

Reinhard Weiß

Grundlegendes zur Quantenmechanik

Herleitungen und Erläuterungen

02.11.2025

Inhaltsverzeichnis

1	Axiome der Quantentheorie	5
2	Rechnen mit komplexen Vektoren und Matrizen bzw. Operatoren	8
2.1	Rechenregeln	8
2.2	Veranschaulichung des komplexen Standardskalarprodukts und der Multiplikation komplexer Vektoren mit komplexen Matrizen	13
2.3	Matrixdarstellung von Operatoren	16
3	Eigenwertgleichung einer 2-reihigen reellen Matrix – Verallgemeinerungen für n-reihige Matrizen	19
4	Hilbertraum, Hermitesche Matrizen (Operatoren) und ihre Eigenschaften	24
5	Unitäre Matrizen (Operatoren)	27
5.1	Eigenschaften unitärer Matrizen (Operatoren)	27
5.2	Unitäre Transformation	28
5.3	Diagonalisierung von Matrizen (Operatoren)	30
6	Spur einer Matrix	33
7	Das quantenmechanische Messproblem	35
7.1	Observable, Messvorgang und Messergebnis	35
7.2	Gemischte Zustände	37
7.3	Der statistische Operator (Dichtematrix)	39
8	Randbedingungen	43
9	Dirac-Formalismus	44
9.1	Übergang Hilbert-Vektor – Dirac-Vektor	44
9.2	Entwicklungssatz, Orthonormalität, Vollständigkeit und Skalarprodukt in kontinuierlicher Basis	47
9.3	Darstellung des formalen Dirac-Vektors in kontinuierlicher Basis und sein Eigendifferential	49
9.4	Orts- und Impulsdarstellung von Zustandsvektoren und Operatoren . .	50
9.4.1	Ortsdarstellung der Impulseigenzustände	53
9.4.2	Impulsdarstellung der Ortseigenzustände	56
10	Fourier-Transformation der Impuls- und Ortseigenfunktionen	57
11	Zusammenfassung Dirac-Formalismus	60
12	Produktansatz bzw. Separationsansatz	66

Literaturtipps

Jan Plefka, *Einführungskurs in die Quantenmechanik – Vorlesungsskript zum theoretischen Teil des Moduls P3 „Einführung in die Quantenphysik“*,
Institut für Physik an der Humboldt-Universität zu Berlin, 16. Oktober 2013,
<https://people.physik.hu-berlin.de/~plefka/lehre/qm1.pdf>

Eine sehr anschauliche und insbesondere am Modell der Polarisierung des Lichtes dargestellte Einführung in die Quantenphysik und ihre Symbolik bzw. Notation findet man im Internet unter:

Josef Oswald, *Grundprinzipien der Quantenphysik, Vorlesung – WS03/04*,
https://oswald.unileoben.ac.at/qpv1_1/qpv1.pdf

1 Axiome der Quantentheorie

Bis zur Unterbrechungslinie auf dieser Seite ist dieses Kapitel zitiert aus: Franz Schwabl, *Quantenmechanik*, 6. Auflage, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2005, Seite 41.

- I) Der Zustand wird durch die Wellenfunktion $\Psi(\vec{x})$ beschrieben.
- II) Den Observablen entsprechen hermitesche Operatoren $A \dots$, wobei Funktionen von Observablen Funktionen von Operatoren entsprechen.
- III) Der Mittelwert der Observablen mit zugehörigem Operator A ist im Zustand Ψ durch

$$\langle A \rangle = (\Psi, A\Psi)$$

gegeben.¹

- IV) Die Zeitentwicklung der Zustände wird durch die Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi = H\Psi, \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{x})$$

bestimmt.

- V) Wenn bei Messung von A der Wert a_n gefunden wurde, geht die Wellenfunktion in die entsprechende Eigenfunktion Ψ_n über.

Aus den Axiomen II und III folgt, daß die möglichen Meßwerte einer Observablen die Eigenwerte des zugehörigen Operators A sind und die Wahrscheinlichkeiten gegeben sind durch $|c_n|^2$, wobei c_n die Entwicklungskoeffizienten von $\Psi(\vec{x})$ nach den Eigenfunktionen von A sind. Insbesondere folgt, daß $|\Psi(\vec{x})|^2$ die Wahrscheinlichkeitsdichte für die Position ist.

Anmerkungen:

Das *Eigen* in *Eigenvektor*, *Eigenfunktion* und *Eigenwert* bezieht sich auf die *Eigenschaften* bzw. *Eigenheiten* der Eigenvektoren, Eigenfunktionen und Eigenwerte und hat nichts zu tun mit dem deutschen Physiker und Chemiker Manfred Eigen (1927–2019, Nobelpreis für Chemie 1967). In der englischsprachigen Fachliteratur werden die teilweise aus dem Deutschen entlehnten Begriffe *eigenvector* für Eigenvektor, *eigenfunction* für Eigenfunktion und *eigenvalue* für Eigenwert verwendet.

Eine quantenphysikalische Messgröße nennt man Observable. Der Observablen ist ein Operator zugeordnet. Operatoren werden meistens mit einem Dach-Symbol notiert wie beispielsweise $\hat{A}$. Leider ist die Notation von Observablen und Operatoren in der Literatur nicht einheitlich. Außerdem werden Observablen und Operatoren in der Notation oft gleichbedeutend behandelt. So findet man beispielsweise für den Erwartungswert einer Observablen A sowohl $\langle A \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ als auch $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$.

¹Wir werden im Folgenden für den Erwartungswert (Mittelwert) einer Observablen bzw. eines Operators $\hat{A}$ die **bra-ket-Notation** $\langle \hat{A} \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$ verwenden, genauso wie für das hermitesche Skalarprodukt bzw. Standardskalarprodukt $\langle u | v \rangle$ aus den beiden Hilbertraumvektoren $|u\rangle$ und $|v\rangle$. Die bra-ket-Notation geht auf Paul Dirac zurück und wird deshalb auch **Dirac-Notation** genannt.

- Quantenmechanische Messgrößen (Observablen) entsprechen stets hermiteschen Operatoren.
- Hermitesche Operatoren $\hat{A}$ liefern Eigenwertgleichungen der Form

$$\hat{A}|\psi_n\rangle = a_n|\psi_n\rangle.$$

Die $|\psi_n\rangle$ sind die Eigenfunktionen zum Operator $\hat{A}$ und die a_n die zugehörigen Eigenwerte des Operators $\hat{A}$.

- Die Eigenwerte hermitescher Operatoren sind stets reell.
- Die Eigenfunktionen hermitescher Operatoren zu *verschiedenen* Eigenwerten sind stets orthogonal.

Allerdings können die Eigenwerte entartet sein. Dann existieren mehr als eine ($g > 1$) Eigenfunktion zum selben Eigenwert, sodass dieser Eigenwert g -fach entartet ist. g heißt Entartungsgrad. Die entarteten Eigenfunktionen sind allgemein nicht orthogonal zueinander, lassen sich aber durch unitäre Transformation zueinander orthogonalisieren.

- Die Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ können so gewählt werden, dass sie die

$$\textbf{Orthogonalitätsrelation} \quad \langle\psi_m|\psi_n\rangle = \delta_{mn}$$

erfüllen.

Die Eigenfunktionen lassen sich also normieren, sodass gilt:

$$\textbf{Orthonormalität} \quad \langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1.$$

Die normierten Eigenfunktionen $|\psi_n\rangle$ bilden dann das **VONS** (vollständige Orthonormalsystem) $\{|\psi_n\rangle\}$ mit der

$$\textbf{Vollständigkeitsrelation} \quad \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n| = \mathbb{1}.$$

- Allgemein wird der Zustand eines quantenmechanischen Systems beschrieben durch den Zustands- bzw. Hilbert-Vektor $|\Psi\rangle$. Bezüglich eines Operators $\hat{A}$ mit dem zugehörigen VONS $\{|\psi_n\rangle\}$ lässt sich $|\Psi\rangle$ entwickeln gemäß dem

$$\begin{aligned} \textbf{Entwicklungssatz} \quad |\Psi\rangle &= \sum_n \underbrace{\langle\psi_n|\Psi\rangle}_{c_n} |\psi_n\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \\ &= \underbrace{\sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|}_{=\mathbb{1}} |\Psi\rangle. \end{aligned}$$

Die **Entwicklungskoeffizienten** c_n sind Skalarprodukte und die Projektionen des Zustandsvektors $|\Psi\rangle$ auf die Basisvektoren $|\psi_n\rangle$.

- Der Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ soll normiert sein, sodass

$$\begin{aligned} \left\| |\Psi\rangle \right\|^2 &= \langle \Psi | \Psi \rangle \stackrel{!}{=} 1 = \sum_n \langle \Psi | c_n^* c_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle \cdot \sum_n |c_n|^2 \\ &\Rightarrow \sum_n |c_n|^2 = 1 . \end{aligned}$$

Das Betragsquadrat $|c_n|^2$ des Entwicklungskoeffizienten c_n ist demzufolge die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Zustands $|\Psi\rangle$ bezüglich des Basiszustands bzw. bezüglich des Basisvektors $|\psi_n\rangle$.

Um quantenmechanische Probleme im Speziellen zu lösen bzw. zu berechnen, geht man allgemein über zu Dirac-Vektoren, die sich auf kontinuierliche Basen beziehen wie beispielsweise die Ortsraumkoordinaten (siehe Kapitel 9).

2 Rechnen mit komplexen Vektoren und Matrizen bzw. Operatoren

2.1 Rechenregeln

- In bra-ket-Notation (Dirac-Notation) sind basisfreie (abstrakte) Vektoren z. B. der bra-Vektor (Zeilenvektor) $\langle u|$ und der ket-Vektor (Spaltenvektor) $|v\rangle$. Sie bilden das komplexe Standardskalarprodukt $\langle u|v\rangle$. Sie lassen sich in einer vollständigen Orthonormalbasis (VON-Basis), z. B. $\{|a\rangle_i\}$, darstellen bzw. entwickeln, sodass wir dann mit den Entwicklungskoeffizienten u_i und v_i schreiben können:

$$|v\rangle = \sum_i \langle a_i|v\rangle |a_i\rangle = \sum_i v_i |a_i\rangle ,$$

$$|v\rangle := \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \end{pmatrix} = v \quad \Rightarrow \quad |v\rangle \neq v ,$$

$$\begin{aligned} \langle u| &= \sum_i \langle a_i|\langle u|a_i\rangle = \sum_i \langle a_i|u_i^* \stackrel{u_i^* \text{ ist Skalar}}{=} \sum_i u_i^* \langle a_i| \\ &= \sum_i \underbrace{\langle u|a_i\rangle}_{=u_i^*} \langle a_i| \stackrel{(2.1)}{=} \langle u| \sum_i |a_i\rangle \langle a_i| \stackrel{(2.2)}{=} \langle u|\mathbb{1} = \langle u| , \\ \langle u| &:= (u_1^* \quad u_2^* \quad \cdots \quad u_i^* \quad \cdots) = (u^*)^T \quad \Rightarrow \quad \langle u| \neq (u^*)^T . \end{aligned}$$

Basisfreie (abstrakte) Operatoren bezeichnen wir z. B. mit $\hat{A}$, Matrizen aber mit $A = (A_{ij})$ und die Matrixelemente mit A_{ij} . In einer zum Operator $\hat{A}$ passenden VON-Basis $\{|a\rangle_i\}$ erhält $\hat{A}$ die Darstellung

$$\hat{A} = \sum_{i,j} |a_i\rangle \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle \langle a_j| = \sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle \langle a_j|$$

mit den Matrixelementen

$$\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = A_{ij}$$

und der aus diesen A_{ij} gebildeten und zum Operator $\hat{A}$ gehörenden Matrix

$$(A_{ij}) = A \quad \Rightarrow \quad \hat{A} \neq A .$$

- Adjungiert (hochgestellter Index †) heißt komplex konjugiert (hochgestellter Index *) und zusätzlich transponiert (hochgestellter Index T), also sinngemäß

$$\dagger = * \wedge T = T \wedge * .$$

Beispiel: Matrix A :

$$A^\dagger = (A^*)^T = (A^T)^* ,$$

Beispiel: Zustands-ket-Vektor $|v\rangle$ (entspricht einem Spaltenvektor):

$$(|v\rangle^*)^T = |v\rangle^\dagger = \langle v| .$$

Der resultierende Zustands-bra-Vektor $\langle v|$ entspricht einem Zeilenvektor, dessen Elemente (Komponenten) die komplex konjugierten Elemente des zugehörigen ket-Vektors $|v\rangle$ sind.

Beispiel: Spaltenvektor $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ analog zu $|v\rangle$:

$$(\vec{v}^*)^T = \vec{v}^\dagger = (v_1^* , v_2^*) .$$

- A ist hermitesch, wenn $A = A^\dagger$, beispielsweise

$$A = \begin{pmatrix} a & ic \\ -ic & b \end{pmatrix} = A^\dagger , \quad \begin{Bmatrix} a \\ b \\ c \end{Bmatrix} \in \mathbb{R} .$$

- A ist antihermitesch, wenn $A = -A^\dagger$ bzw. $iA = (iA)^\dagger$, beispielsweise

$$A = \begin{pmatrix} -ia & c \\ -c & ib \end{pmatrix} = -A^\dagger , \quad \begin{Bmatrix} a \\ b \\ c \end{Bmatrix} \in \mathbb{R} .$$

- Ein linearer Operator A (bzw. eine lineare Matrix) lässt sich zerlegen in einen hermiteschen Operator A_h und einen antihermiteschen Operator A_a gemäß

$$A = A_h + A_a , \quad A_h = \frac{A + A^\dagger}{2} , \quad A_a = \frac{A - A^\dagger}{2} .$$

- Die Verallgemeinerung des transponierten Produkts $(A \cdot B)^T = B^T \cdot A^T$ aus reellen Matrizen A, B ist das adjungierte Produkt aus den (komplexen) Matrizen A, B

$$(A \cdot B)^\dagger = B^\dagger \cdot A^\dagger .$$

- Adjungieren eines Zustands-ket-Vektors $|v\rangle$:

$$|v\rangle^\dagger = \langle v| .$$

Veranschaulichung: $\begin{pmatrix} ia \\ ib \end{pmatrix}^\dagger = (-ia , -ib) .$

- Das komplexe Standardskalarprodukt (kurz Skalarprodukt)

$$\begin{pmatrix} \alpha^* u_1^* & \alpha^* u_2^* & \cdots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \beta v_1 \\ \beta v_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \alpha^* \beta (u_1^* v_1 + u_2^* v_2 + \cdots)$$

liefert also mit $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ einen Skalar gemäß

$$\begin{aligned}\langle \alpha u | \beta v \rangle &= \alpha^* \langle u | \beta v \rangle = \alpha^* \beta \langle u | v \rangle \\ &= \left(\langle \beta v | \alpha u \rangle \right)^* = \left(\beta^* \alpha \langle v | u \rangle \right)^* = \alpha^* \beta \left(\langle v | u \rangle \right)^* = \alpha^* \beta \langle u | v \rangle .\end{aligned}$$

Das Skalarprodukt ist also antilinear (konjugiert linear) im ersten und linear im zweiten Argument.

- Das Skalarprodukt c_i aus dem Zustandsvektor $|v\rangle$ und dem Basisvektor $|a_i\rangle$, also $c_i = \langle a_i | v \rangle$, ist die Projektion von $|v\rangle$ auf $|a_i\rangle$, gesprochen: „Skalarprodukt v in a_i “. c_i ist somit die komplexe skalare Vektorkomponente von $|v\rangle$ „in Richtung“ des Basisvektors $|a_i\rangle$.
- Adjungieren des Skalarprodukts $\langle u | v \rangle$:

$$\begin{aligned}(\langle u | v \rangle)^\dagger &= |v\rangle^\dagger \cdot \langle u|^\dagger = \langle v | u \rangle = \sum_i v_i^* u_i \\ &= (\langle u | v \rangle)^* = \left(\sum_i u_i^* v_i \right)^* \Rightarrow \\ (\langle u | v \rangle)^\dagger &= (\langle u | v \rangle)^* = \langle v | u \rangle .\end{aligned}$$

- Adjungieren eines Matrix-Vektor-Produkts:

$$\begin{aligned}A|u\rangle &= |v\rangle \Rightarrow \\ (A|u\rangle)^\dagger &= (|u\rangle)^\dagger A^\dagger = \langle u | A^\dagger = |v\rangle^\dagger = \langle v| ,\end{aligned}$$

wobei $A^\dagger$ rechts von $\langle u |$ stehen muss, u. a. weil $\langle u |$ ein Zeilenvektor ist.

- Adjungieren eines Matrix-Matrix-Vektor-Produkts:

$$\left[A (B|u\rangle) \right]^\dagger = |v\rangle^\dagger = \langle v| = (\langle u | B^\dagger) A^\dagger .$$

Hierbei ist die Reihenfolge von Matrizen und Vektor zu beachten.

- Das dyadische Produkt liefert eine Matrix gemäß

$$|u\rangle\langle v| = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \end{pmatrix} \cdot (v_1^* \quad v_2^* \quad \dots) = \begin{pmatrix} u_1 v_1^* & u_1 v_2^* & \dots \\ u_2 v_1^* & u_2 v_2^* & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} .$$

Die Vektoren (Faktoren) des dyadischen Produkts dürfen in ihrer Reihenfolge nicht vertauscht werden, wie man in der Veranschaulichung an einem einfachen Beispiel sofort erkennt.

Adjungieren eines dyadischen Produkts:

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = \langle v|^\dagger |u\rangle^\dagger = |v\rangle\langle u| .$$

Mit den Basisvektoren $|a_i\rangle$ der VON-Basis¹ $\{|a_i\rangle\}$ ist der Einsoperator $\mathbb{1}$, auch Identitätsoperator genannt, die Summe aus den

$$\text{Projektionsoperatoren} \quad P_i = |a_i\rangle\langle a_i|.$$

Für die orthonormierten Basisvektoren gilt $\langle a_i|a_j\rangle = \langle a_i|a_j\rangle^* = \delta_{ij}$. Wir veranschaulichen die Darstellung des Einsoperators für $i = 1, 2$:

$$\sum_{i=1}^2 P_i = \sum_{i=1}^2 |a_i\rangle\langle a_i| \quad (2.1)$$

$$\begin{aligned} &= \begin{pmatrix} a_1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot (a_1^* \ 0) + \begin{pmatrix} 0 \\ a_2 \end{pmatrix} \cdot (0 \ a_2^*) \\ &= \begin{pmatrix} a_1 a_1^* & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & a_2 a_2^* \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle a_1|a_1\rangle & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \langle a_2|a_2\rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbb{1}. \quad \square \end{aligned} \quad (2.2)$$

- In Analogie zur Darstellung eines Vektors $\vec{v}$ durch seine skalaren Vektorkomponenten v_1, v_2, v_3 in der VON-Basis $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3\}$ im $\mathbb{R}^3$ gemäß

$$\begin{aligned} \vec{v} &= (\vec{e}_1 \cdot \vec{v}) \cdot \vec{e}_1 + (\vec{e}_2 \cdot \vec{v}) \cdot \vec{e}_2 + (\vec{e}_3 \cdot \vec{v}) \cdot \vec{e}_3 \\ &= \sum_{i=1}^3 \underbrace{(\vec{e}_i \cdot \vec{v})}_{v_i} \cdot \vec{e}_i = \sum_{i=1}^3 v_i \cdot \vec{e}_i = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

wird die Darstellung (Entwicklung) eines (Zustands)vektors $|v\rangle$ nach der VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$ im $\mathbb{C}^n$ beschrieben durch den **Entwicklungssatz**

$$\begin{aligned} |v\rangle &= \sum_{i=1}^n \underbrace{\langle a_i|v\rangle}_{v_i} |a_i\rangle = \sum_{i=1}^n v_i |a_i\rangle := \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a_1|v\rangle \\ \langle a_2|v\rangle \\ \vdots \\ \langle a_i|v\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.3) \\ &= \sum_{i=1}^n \underbrace{|a_i\rangle\langle a_i|}_{P_i} |v\rangle = \sum_{i=1}^n P_i |v\rangle \\ &= \mathbb{1}|v\rangle = |v\rangle. \end{aligned}$$

¹VON-Basis heißt vollständige Orthonormalbasis und ist gleichbedeutend mit der Bezeichnung vollständiges Orthonormalsystem (VONS). Meistens ist die VON-Basis gemeint, wenn kurz von einer Basis die Rede ist.

Die Projektionen von $|v\rangle$ auf $|a_i\rangle$ bzw. die Skalarprodukte $|v\rangle$ in $|a_i\rangle$ sind die **Entwicklungskoeffizienten** $v_i \in \mathbb{C}$. In (2.3) steht ganz bewusst nicht das Gleichheitszeichen, sondern das $:=$ -Zeichen („definiert durch“). Wir werden auf diesen Umstand im Zusammenhang mit der Matrixdarstellung von Operatoren im Abschnitt 2.3 zurückkommen.

- Darstellung des **komplexen Standardskalarprodukts** in der VON-Basis $\{a_i\}$:

Wir gehen dabei aus vom basisfreien Standardskalarprodukt $\langle u|v\rangle$ und müssen berücksichtigen, dass das komplexe Standardskalarprodukt **hermitesch** ist gemäß

$$\langle u|v\rangle = (\langle v|u\rangle)^* \stackrel{\text{i.A.}}{\implies} \langle u|v\rangle \neq \langle v|u\rangle : \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} \langle u|v\rangle &= \sum_{ij} \langle a_i|\langle u|a_i\rangle \langle a_j|v\rangle|a_j\rangle = \sum_{ij} \langle a_i|u_i^* v_j|a_j\rangle \\ &= \sum_{ij} u_i^* v_j \underbrace{\langle a_i|a_j\rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_i u_i^* v_i . \end{aligned}$$

Die Beziehung $\langle u|v\rangle = (\langle v|u\rangle)^*$ zeigt die **Konjugationssymmetrie** des hermiteschen Skalarprodukts.

- Aus der **Hermitezität** in (2.4) folgt für das Standardskalarprodukt eines komplexen Vektors $|v\rangle$ mit sich selbst:

$$\langle v|v\rangle = (\langle v|v\rangle)^* \implies \begin{cases} \langle v|v\rangle \in \mathbb{R} , \\ \langle v|v\rangle \geq 0 \text{ und somit } \mathbf{positiv\ defin\it{it}} . \end{cases} \quad (2.5)$$

(2.5) lässt sich zurückführen auf das Normquadrat einer komplexen Zahl z :

$$z^* \cdot z = (a - ib)(a + ib) = a^2 + b^2 = |z|^2 \implies \begin{cases} z^* z \in \mathbb{R} , \\ z^* z \geq 0 . \end{cases}$$

2.2 Veranschaulichung des komplexen Standardskalarprodukts und der Multiplikation komplexer Vektoren mit komplexen Matrizen

Summen und Produkte aus komplexen Zahlen werde komplex konjugiert, indem alle Summanden und Faktoren jeweils für sich komplex konjugiert werden. Wir zeigen dies für das Produkt aus zwei komplexen Zahlen:

$$\begin{aligned} [(a + ib)(c + id)]^* &= [ac + i(ad + bc) - bd]^* \\ &= (a - ib)(c - id) = ac - i(ad + bc) - bd, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [(a - ib)(c - id)]^* &= [ac - i(ad + bc) - bd]^* \\ &= (a + ib)(c + id) = ac + i(ad + bc) - bd, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [(a + ib)(c - id)]^* &= [ac - i(ad - bc) + bd]^* \\ &= (a - ib)(c + id) = ac + i(ad - bc) + bd. \end{aligned}$$

Das komplexe Standardskalarprodukt (kurz Skalarprodukt) ist definiert durch

$$\langle u|v \rangle := \sum_{i=1}^n u_i^* \cdot v_i, \quad u_i, v_i \in \mathbb{C}.$$

Hierbei ist $|v\rangle$ ein komplexer Spaltenvektor und $\langle u|$ ein komplexer Zeilenvektor. Der Zusammenhang zwischen einem bra-Vektor $\langle w|$ und dem zugehörigen ket-Vektor $|w\rangle$ ist

$$(|w\rangle^*)^T = |w\rangle^\dagger = \langle w|.$$

Der hochgestellte Index $*$ bedeutet *komplex konjugiert*, T bedeutet *transponiert* und † bedeutet *adjungiert*, also sowohl komplex konjugiert als auch transponiert.

Zunächst zeigen wir

$$\langle u|v \rangle = \sum_i u_i^* \cdot v_i = \sum_i (v_i^* \cdot u_i)^* = \langle v|u \rangle^* \quad \Rightarrow \quad \vec{u}^* \cdot \vec{v} = (\vec{v}^* \cdot \vec{u})^*$$

am Beispiel der Vektoren²

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} -2i \\ 2 - 3i \end{pmatrix} = \vec{u}, \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} 1 - i \\ i \end{pmatrix} = \vec{v} :$$

²Mit der Notation $\vec{v}$ für Spaltenvektoren und $\vec{v}^T$ für Zeilenvektoren ist $(\vec{u}^*)^T \cdot \vec{v} = \vec{u}^\dagger \cdot \vec{v} = \vec{u}^* \cdot \vec{v}$ das Punktprodukt $\vec{u}^* \cdot \vec{v} = \sum_i u_i^* \cdot v_i$. Man achte auf den Unterschied zwischen der Verwendung des Multiplikationspunktes $\cdot$ und der Verwendung des fettgedruckten Symbols $\cdot$.

$$\begin{aligned}\langle u|v\rangle &= (2i, 2+3i) \begin{pmatrix} 1-i \\ i \end{pmatrix} = -1+4i, \\ \langle v|u\rangle &= (1+i, -i) \begin{pmatrix} -2i \\ 2-3i \end{pmatrix} = -1-4i,\end{aligned}$$

$$\langle v|u\rangle^* = -1+4i = \langle u|v\rangle. \quad \square$$

Jetzt zeigen wir die Wirkung einer komplexen (komplexwertigen) Matrix innerhalb des Skalarprodukts am Beispiel der Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 2+i & 3i \\ -2i & 1-i \end{pmatrix}, \quad A^\dagger = \begin{pmatrix} 2-i & 2i \\ -3i & 1+i \end{pmatrix} :$$

$$\begin{aligned}\langle u|\underbrace{A|v\rangle}_{=|w\rangle} &= \langle u|w\rangle = \langle u| \cdot (A|v\rangle) = \\ &= (2i, 2+3i) \cdot \begin{pmatrix} 2+i & 3i \\ -2i & 1-i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1-i \\ i \end{pmatrix} \\ &= (2i, 2+3i) \cdot \begin{pmatrix} -i \\ -1-i \end{pmatrix} = 3-5i\end{aligned}$$

mit

$$A|v\rangle = |w\rangle = \begin{pmatrix} -i \\ -1-i \end{pmatrix}.$$

Zum gleichen Ergebnis kommen wir mit der Rechnung

$$\begin{aligned}\underbrace{\langle u|A|v\rangle}_{=\langle m|} &= \langle m|v\rangle = (\langle u|A) \cdot |v\rangle = \\ (2i, 2+3i) \cdot \begin{pmatrix} 2+i & 3i \\ -2i & 1-i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1-i \\ i \end{pmatrix} &= \\ (4, -1+i) \cdot \begin{pmatrix} 1-i \\ i \end{pmatrix} &= 3-5i.\end{aligned}$$

Mit

$$\begin{aligned} (A|v\rangle)^\dagger &= |w\rangle^\dagger = \langle w| = |v\rangle^\dagger A^\dagger = \langle v|A^\dagger \\ &= (1+i, -i) \cdot \begin{pmatrix} 2-i & 2i \\ -3i & 1+i \end{pmatrix} = (i, -1+i) \end{aligned} \quad (2.6)$$

und

$$A^\dagger|u\rangle = \begin{pmatrix} 2-i & 2i \\ -3i & 1+i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -2i \\ 2-3i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ -1-i \end{pmatrix}$$

zeigen wir schließlich

$$\begin{aligned} \langle u|w\rangle^* &= \langle w|u\rangle = \langle v|A^\dagger|u\rangle = 3+5i : \\ (1+i, -i) \cdot \begin{pmatrix} 2-i & 2i \\ -3i & 1+i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -2i \\ 2-3i \end{pmatrix} &= \\ = (\langle v|A^\dagger) \cdot |u\rangle &= (i, -1+i) \cdot \begin{pmatrix} -2i \\ 2-3i \end{pmatrix} = 3+5i, \\ = \langle v| \cdot (A^\dagger|u\rangle) &= (1+i, -i) \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ -1-i \end{pmatrix} = 3+5i. \quad \square \end{aligned}$$

Wichtig für das Verständnis und für die Praxis sind die aus (2.6) abgeleiteten und im Einklang mit $(A \cdot B)^\dagger = B^\dagger \cdot A^\dagger$ stehenden Beziehungen

$$\langle m| = \langle u|A = |u\rangle^\dagger A = (A^\dagger|u\rangle)^\dagger = |m\rangle^\dagger \quad \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \langle m| &= \langle u|A \quad \Leftrightarrow \quad |m\rangle = A^\dagger|u\rangle, \\ |w\rangle &= A|v\rangle \quad \Leftrightarrow \quad \langle w| = \langle v|A^\dagger. \end{aligned}$$

Im Zusammenhang mit hermiteschen Matrizen werden uns diese Beziehungen noch beschäftigen.

2.3 Matrixdarstellung von Operatoren

Nach:

Christian B. Lang und Norbert Pucker, *Mathematische Methoden in der Physik*, Hochschultaschenbuch, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1998, Seite 425.

Siehe auch:

Torsten Fließbach, *Quantenmechanik, Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*, 4. Auflage, Elsevier-Spektrum Akademischer Verlag, München, 2005, Seite 235 bis Seite 237 und

http://schwalbe.org.chemie.uni-frankfurt.de/sites/default/files/attachements/mathematische_methoden_in_der_nmr-spektroskopie/skript_zur_ubung_1.pdf.

In diesem Abschnitt zeigen wir, dass man einen Operator A als Matrix auffassen und dementsprechend mit ihm umgehen darf. Dazu gehen wir mit den Entwicklungskoeffizienten u_j von $|u\rangle$ und v_i von $|v\rangle$ aus von der (basisfreien) **Operatorgleichung**

$$|v\rangle = \hat{A} |u\rangle . \quad (2.7)$$

Zunächst zeigen wir die Entwicklung dieser Operatorgleichung nach der VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$:

$$\begin{aligned} \sum_j \underbrace{\langle a_j | v \rangle}_{v_j} |a_j\rangle &= \hat{A} \sum_j \underbrace{\langle a_j | u \rangle}_{u_j} |a_j\rangle \\ \sum_j v_j |a_j\rangle &= \hat{A} \sum_j u_j |a_j\rangle = \sum_j u_j \hat{A} |a_j\rangle . \end{aligned}$$

Durch das Skalarprodukt mit $|a_i\rangle$ werden jetzt die Komponenten v_i „herausprojiziert“:

$$\sum_j v_j \underbrace{\langle a_i | a_j \rangle}_{\delta_{ij}} = \sum_j u_j \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle .$$

In Komponentenschreibweise ergibt dies

$$\boxed{v_i = \sum_j \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \cdot u_j} \quad (2.8)$$

und mit der Notation für die **Matrixelemente** $\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle = A_{ij}$ für die Matrix

$$\boxed{(\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle) = (A_{ij})} . \quad (2.9)$$

Damit können wir (2.8) als **Matrixgleichung** in der Basis $\{|a_i\rangle\}$ formulieren:

$$v_i = \sum_j A_{ij} \cdot u_j \quad \Rightarrow \quad \underbrace{\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\text{Matrixgleichung}} = (A_{ij}) \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \end{pmatrix} =: \underbrace{|v\rangle = \hat{A} |u\rangle}_{\text{basisfrei}} . \quad (2.10)$$

Die Matrixelemente $\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle$ sind Skalarprodukte. Sie wichten die $|u\rangle$ -Komponenten u_j bei der Summierung zur $|v\rangle$ -Komponente v_i .

Zum besseren Verständnis zeigen wir noch, wie sich der Operator $\hat{A}$ im

Skalarprodukt $\langle v | \hat{A} | u \rangle$

darstellt. Durch Einschieben von zwei Identitätsoperatoren erhalten wir daraus in Komponentenschreibweise

$$\langle v | \hat{A} | u \rangle = \langle v | \mathbb{1} \hat{A} \mathbb{1} | u \rangle = \sum_{i,j} \underbrace{\langle v | a_i \rangle}_{v_i^*} \underbrace{\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle}_{A_{ij}} \underbrace{\langle a_j | u \rangle}_{u_j} = \sum_{i,j} v_i^* A_{ij} u_j \quad (2.11)$$

mit den skalaren Vektorkomponenten $\langle v | a_i \rangle = v_i^*$ und $\langle a_j | u \rangle = u_j$. Wenn wir die Vektoren und die Matrix (in Matrixschreibweise) vollständig ausschreiben, erkennen wir wieder die Matrixdarstellung (A_{ij}) des Operators $\hat{A}$:

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} v_i^* A_{ij} u_j &= \begin{pmatrix} v_1^* & v_2^* & \cdots & v_i^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \cdots & A_{ij} & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_j \\ \vdots \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \langle v | a_1 \rangle & \langle v | a_2 \rangle & \cdots & \langle v | a_i \rangle & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a_1 | \hat{A} | a_1 \rangle & \langle a_1 | \hat{A} | a_2 \rangle & \cdots & \langle a_1 | \hat{A} | a_j \rangle & \cdots \\ \langle a_2 | \hat{A} | a_1 \rangle & \langle a_2 | \hat{A} | a_2 \rangle & \cdots & \langle a_2 | \hat{A} | a_j \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ \langle a_i | \hat{A} | a_1 \rangle & \langle a_i | \hat{A} | a_2 \rangle & \cdots & \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a_1 | u \rangle \\ \langle a_2 | u \rangle \\ \vdots \\ \langle a_j | u \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \\ &= \langle v | \mathbb{1} \hat{A} \mathbb{1} | u \rangle = \langle v | \hat{A} | u \rangle . \end{aligned}$$

Jetzt zeigen wir die im Grunde genommen äquivalente Variante der „eigentlichen“ Matrixdarstellung des Operators $\hat{A}$. Dafür benutzen wir wieder die Operatorgleichung (2.7):

$$\begin{aligned} |v\rangle &= \hat{A} |u\rangle \\ \mathbb{1} |v\rangle &= \mathbb{1} \hat{A} \mathbb{1} |u\rangle \\ \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | v \rangle &= \sum_{i,j} |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle}_{A_{ij}} \langle a_j | u \rangle \\ \sum_i \langle a_i | v \rangle |a_i\rangle &= \underbrace{\sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle \langle a_j |}_{\hat{A}} u \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$|v\rangle = \hat{A} |u\rangle . \quad \square \quad (2.13)$$

Wie wir sehen, ist die „eigentliche“ **Matrixdarstellung des Operators $\hat{A}$**

$$\boxed{\hat{A} = \mathbb{1}\hat{A}\mathbb{1} = \sum_{i,j} |a_i\rangle\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle\langle a_j| = \sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle\langle a_j|} . \quad (2.14)$$

Bei einem Vergleich der Matrixgleichung in (2.10) mit (2.12), der Operatorgleichung in der Basis $\{|a_i\rangle\}$, und der basisfreien Operatorgleichung (2.13) stellen wir fest, dass

$$\hat{A} = \sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle\langle a_j| \neq (A_{ij}) .$$

Dies liegt daran, dass wir für (2.12) den linken Teil des Entwicklungssatzes (2.3)

$$|v\rangle = \sum_i v_i |a_i\rangle$$

verwendet haben und für (2.10) den rechten Teil

$$|v\rangle := \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \end{pmatrix} .$$

Wenn wir nämlich die Matrixgleichung (2.10) gegenüberstellen der Operatorgleichung (2.12), berechnet nur für die Komponente v_i , sehen wir

$$\boxed{(2.10) \ v_i = \sum_j A_{ij} u_j \quad \neq \quad (2.12) \ v_i |a_i\rangle = \left(\sum_j A_{ij} u_j \right) |a_i\rangle} . \quad (2.15)$$

Hierbei sind $v_i = \langle a_i | v \rangle$ und $u_j = \langle a_j | u \rangle$. Als Analogie im $\mathbb{R}^3$ ergibt (2.15) z. B. für die Komponente mit $i = 2$

$$v_2 = A_{21}u_1 + A_{22}u_2 + A_{23}u_3 \quad \neq \quad v_2 \cdot \vec{e}_2 = (A_{21}u_1 + A_{22}u_2 + A_{23}u_3) \cdot \vec{e}_2 .$$

Im Gegensatz zur Matrixgleichung (2.10) beinhaltet die Operatorgleichung (2.12) nämlich den zum Entwicklungskoeffizienten bzw. zur skalaren Vektorkomponente v_i gehörenden Basisvektor $|a_i\rangle$.

3 Eigenwertgleichung einer 2-reihigen reellen Matrix – Verallgemeinerungen für n -reihige Matrizen

Siehe auch:

Lothar Papula, *Mathematik für Ingenieure und Naturwissenschaftler Band 2*, 10. Auflage, Vieweg, Braunschweig, Wiesbaden, 2001, Seite 121 bis Seite 140

und

Christian B. Lang und Norbert Pucker, *Mathematische Methoden in der Physik*, Spektrum, Heidelberg, Berlin, 1998, Seite 204 bis 211, Seite 414 bis 422.

Wir gehen aus von der linearen Abbildungsgleichung (Transformationsgleichung)

$$A\vec{x} = \vec{y}$$

im $\mathbb{R}^2$ bzw. in der Ebene. Dabei seien die Funktion A eine 2-reihige (quadratische) reelle Matrix und $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$ und $\vec{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$ die Ortsvektoren zur Beschreibung der Punkte $P_{\vec{x}} := \{x_1, x_2\}$ und $P_{\vec{y}} := \{y_1, y_2\}$. Die Wirkung von A auf den Ortsvektor $\vec{x}$ kann allgemein sowohl in einer Drehung als auch in einer Längenänderung bestehen, woraus dann der Ortsvektor $\vec{y}$ resultiert (s. Abb. 3.1 a). Beispielsweise liefern

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}, \quad \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A\vec{x} = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \vec{y}.$$

Wir gehen jetzt der Frage nach, ob zur Matrix A Vektoren $\vec{x}$ existieren, sodass $\vec{y}$ kollinear zu $\vec{x}$ verläuft (s. Abb. 3.1 b).

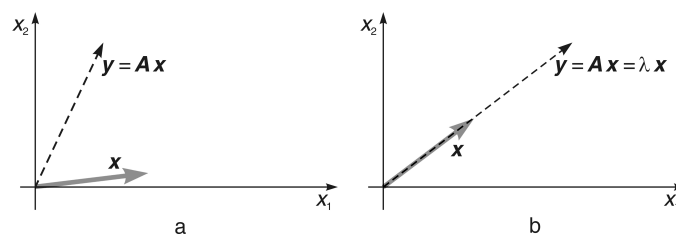


Abb. 3.1

a Die Matrix A bewirkt sowohl eine Längenänderung als auch eine Drehung am Vektor $\vec{x}$ und überführt diesen so in den Vektor $\vec{y}$. Der Vektor $\vec{x}$ ist folglich kein Eigenvektor zu A .

b Die Matrix A überführt den Vektor $\vec{x}$ (ohne Drehung) in den zu $\vec{x}$ kollinearen Vektor $\vec{y}$. Der Vektor $\vec{x}$ ist somit ein Eigenvektor zur Matrix A .

In diesem Fall resultiert mit der Einheitsmatrix $E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$A\vec{x} = \lambda\vec{x} = \lambda \cdot E\vec{x} = \vec{y}, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (3.1)$$

Um $\vec{x}$ zu bestimmen bilden wir aus (3.1) durch die Äquivalenzumformung

$$A \cdot \vec{x} = \lambda E \cdot \vec{x} \quad \Leftrightarrow \quad (A - \lambda E) \cdot \vec{x} = 0$$

das homogene lineare Gleichungssystem (LGS)

$$\left[\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} \right] \cdot \vec{x} = \begin{pmatrix} 2-\lambda & -1 \\ -3 & 4-\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.2)$$

Ein homogenes LGS besitzt nur dann nicht-triviale Lösungen $\vec{x}$, wenn die Koeffizientendeterminante $\det(A - \lambda E)$ verschwindet¹:

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda E) &= \det \begin{pmatrix} 2-\lambda & -1 \\ -3 & 4-\lambda \end{pmatrix} = (2-\lambda)(4-\lambda) - [(-1)(-3)] \\ &= \lambda^2 - 6\lambda + 5 \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

$A - \lambda E$ ist die *charakteristische Matrix* von A und $\lambda^2 - 6\lambda + 5 \stackrel{!}{=} 0$ heißt die *charakteristische Gleichung* bzw. das *charakteristische Polynom* von A . Es ist in diesem Fall eine quadratische Gleichung in λ und somit nur erfüllt für

$$\lambda \Rightarrow \begin{cases} 3 + \sqrt{9-5} = \lambda_1 = 5, \\ 3 - \sqrt{9-5} = \lambda_2 = 1. \end{cases}$$

Die Lösungen λ_1 und λ_2 dieser quadratischen Gleichung, d. h. die Nullstellen des charakteristischen Polynoms von A sind die *Eigenwerte der Matrix* A .

Allgemein können wir für die 2-reihige Determinate der Matrix A

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$$

und für das charakteristische Polynom der Matrix A

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda E) &= \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda \end{vmatrix} = (a_{11} - \lambda)(a_{22} - \lambda) - a_{12}a_{21} \\ &= \lambda^2 - \underbrace{(a_{11} + a_{22})}_{\text{Sp}(A)} \lambda + \underbrace{(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})}_{\det A} \\ \det(A - \lambda E) &= \lambda^2 - \text{Sp}(A) \cdot \lambda + \det A = 0 \end{aligned} \quad (3.3)$$

¹Die Determinante einer Matrix M verschwindet, wenn M singulär (linear abhängig) ist. Folglich ist es erforderlich, dass die charakteristische Matrix $A - \lambda E$ singulär ist.

schreiben. Durch Faktorisierung (Zerlegung in Linearfaktoren) erhält das charakteristische Polynom die Produktform

$$\det(A - \lambda E) = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) = \lambda^2 - (\lambda_1 + \lambda_2) \cdot \lambda + \lambda_1 \lambda_2 . \quad (3.4)$$

Der Koeffizientenvergleich zwischen (3.3) und (3.4) zeigt, wie Spur und Determinante von A mit den Eigenwerten von A zusammenhängen:

$$\begin{aligned} \text{Sp}(A) &= a_{11} + a_{22} = \lambda_1 + \lambda_2 \\ \det A &= a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \lambda_1 \lambda_2 . \end{aligned}$$

Mit den Eigenwerten λ_1 und λ_2 können wir jetzt das homogene LGS (3.2) lösen.

Für $\lambda_1 = 5$ resultiert

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 2 - \lambda_1 & -1 \\ -3 & 4 - \lambda_1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \left. \begin{array}{l} \text{(I)} \quad -3x_1 - x_2 = 0 \\ \text{(II)} \quad -3x_1 - x_2 = 0 \end{array} \right\} &\Leftrightarrow x_2 = -3x_1 . \end{aligned}$$

x_1 ist frei wählbar. Wir setzen $x_1 = \alpha$ und erhalten für den normierten Lösungsvektor $\vec{x}_1$ zum Eigenwert λ_1

$$\boxed{\vec{x}_1(\lambda_1) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} .}$$

Für $\lambda_2 = 1$ resultiert

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 2 - \lambda_2 & -1 \\ -3 & 4 - \lambda_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \\ \left. \begin{array}{l} \text{(I)} \quad x_1 - x_2 = 0 \\ \text{(II)} \quad -3x_1 + 3x_2 = 0 \end{array} \right\} &\Leftrightarrow x_2 = x_1 . \end{aligned}$$

x_1 ist frei wählbar. Wir setzen $x_1 = \beta$ und erhalten für den normierten Lösungsvektor $\vec{x}_2$ zum Eigenwert λ_2

$$\boxed{\vec{x}_2(\lambda_2) = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \beta \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} .}$$

Die Lösungsvektoren $\vec{x}_1$ und $\vec{x}_2$ sind die *Eigenvektoren bezüglich der Matrix A* . Die Eigenvektoren liegen im Kern der charakteristischen Matrix $A - \lambda E$.

Weil α und β frei gewählt werden durften, hätten wir sie auch gleich 1 setzen können. Es ist zwar Konvention, die Eigenvektoren zu normieren, aber nicht unbedingt notwendig. Deshalb führen wir die Probe mit

$$\alpha = 1 \Rightarrow \tilde{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \beta = 1 \Rightarrow \tilde{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

durch:

$$A \cdot \tilde{x}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -15 \end{pmatrix} = 5 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \end{pmatrix} = \lambda \cdot \tilde{x}_1, \quad \lambda = \lambda_1 = 5 \in \mathbb{R},$$

$$A \cdot \tilde{x}_2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = 1 \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \lambda \cdot \tilde{x}_2, \quad \lambda = \lambda_2 = 1 \in \mathbb{R}.$$

Wirkt eine Matrix A auf einen ihrer Eigenvektoren $\vec{x}_i$, so erzeugt sie einen zu $\vec{x}_i$ kollinearen Vektor $\vec{y}_i$, dessen Länge das λ_i -fache der Länge von $\vec{x}_i$ beträgt. Hierbei ist λ_i der zum Eigenvektor $\vec{x}_i$ gehörende Eigenwert der Matrix A . Die Länge der Eigenvektoren $\vec{x}_i$ kann frei gewählt werden. Konventionsgemäß werden die Eigenvektoren aber auf die Länge 1 normiert.

Merke!

Eine Eigenwertgleichung beschreibt die Wirkung einer Matrix A auf einen ihrer Eigenvektoren $\vec{v}$. Diese Wirkung ist die Multiplikation des Eigenvektors mit dem zugehörigen Eigenwert λ . A produziert folglich den Vektor $\lambda\vec{v}$ der parallel (kollinear) zum Eigenvektor $\vec{v}$ ist.

Verallgemeinerungen für n -reihige Matrizen

Die für 2-reihige Matrizen gewonnenen Erkenntnisse lassen sich auf n -reihige Matrizen verallgemeinern.

- Insbesondere gilt für die Eigenwerte n -reihiger Matrizen A

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \cdots + \lambda_n = \text{Sp}(A) , \quad \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \cdots \lambda_n = \det A .$$

- Zu n *verschiedenen* Eigenwerten gehören n linear unabhängige Eigenvektoren.
- Ein k -facher Eigenwert (Vielfachheit k) hat mindestens einen und höchstens k linear unabhängige Eigenvektoren.
- Die Eigenwerte einer Dreiecks- oder Diagonalmatrix A sind identisch mit ihren Hauptdiagonalelementen. Dies resultiert aus den Rechenregeln für Determinanten beispielsweise wie folgt:

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda E) &= \det \begin{pmatrix} a_{11} - \lambda_1 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} - \lambda_2 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} - \lambda_3 \end{pmatrix} \\ &= (a_{11} - \lambda_1)(a_{22} - \lambda_2)(a_{33} - \lambda_3) \stackrel{!}{=} 0 \\ \Rightarrow \quad \lambda_1 &= a_{11} , \quad \lambda_2 = a_{22} , \quad \lambda_3 = a_{33} . \end{aligned}$$

- Die Eigenvektoren bezüglich einer Diagonalmatrix sind die den Eigenwerten λ_i entsprechenden kanonischen Einheitsvektoren $|e_i\rangle$ der Standardbasis $\{|e_i\rangle\}$.
Beispiel zur Veranschaulichung mit dem Eigen- bzw. Basisvektor $|e_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$:

$$A|e_i\rangle = \lambda_i|e_i\rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \lambda_2 \end{pmatrix} = \lambda_2 \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} . \quad \square$$

- Zusätzlich gilt für *reelle* symmetrische Matrizen $A = A^T$:
Alle n Eigenwerte sind reell und die Eigenvektoren von verschiedenen Eigenwerten sind orthogonal.²

²Die Beweise finden sich unter

www.mpi-inf.mpg.de/departments/d1/teaching/ss10/MFI2/kap46.pdf

oder unter dem Suchbegriff „Eigenwerte und Eigenvektoren symmetrischer Matrizen“.

4 Hilbertraum, Hermitesche Matrizen (Operatoren) und ihre Eigenschaften

Die Feststellungen über hermitesche Matrizen gelten auch für hermitesche Operatoren. Abhängig vom Zusammenhang werden wir deshalb im Folgenden entweder von Matrizen oder von Operatoren sprechen. Weil die hermiteschen Operatoren in der Quantenmechanik auf Zustandsvektoren, d. h. auf Elemente des Hilbert-Raums $\mathcal{H}$ wirken, beginnen wir diesen Abschnitt mit der

Definition des Hilbert-Raums:

Im Allgemeinen sind Hilberträume $\mathcal{H}$ *abzählbar-unendlichdimensionale, lineare Vektorräume über $\mathbb{C}$ mit einem Standardskalarprodukt*. Weiterhin sind Hilberträume *vollständig* bezüglich der durch $\| |\Psi\rangle \| = \sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}$ definierten *Norm*, wobei $|\Psi\rangle$ abstrakte, basisfreie Hilbert-Raum-Vektoren (Hilbert-Raum-Elemente) sind.

Die Hilbert-Raum-Vektoren $|\Psi\rangle$ lassen sich nach ihren quadratsummablen Koordinaten entwickeln, die wiederum eine den Hilbertraum vollständig aufspannende Orthonormalbasis bilden. Der Hilbert-Raum zu einem Operator mit einem vollständigen Satz von n linear unabhängigen Eigenvektoren ist ebenfalls n -dimensional.

Hilbert-Räume sind z. B. der $\mathbb{R}^n$, der $\mathbb{C}^n$, der quadratsummable Folgenraum ℓ^2 , aber auch der L^2 -Raum der quadratintegriblen Funktionen.

Hermitesche Matrizen (Operatoren) und ihre Eigenschaften

- Hermitesche Matrizen A sind quadratisch und komplex. Sie lassen sich zerlegen in einen Realteil, die symmetrische reelle Matrix B , und in einen Imaginärteil, die antisymmetrische (schiefsymmetrische) Matrix C . Für eine n -reihige hermitesche Matrix

$$A = A_{n \times n} = B_{n \times n} + i C_{n \times n} \quad \Rightarrow \quad A = B + i C$$

gilt folglich

$$A^\dagger = (B + i C)^\dagger = B^\dagger + C^\dagger i^\dagger = B^T + C^T i^* = B - C(-i) = B + i C = A ,$$

$$A = A^\dagger .$$

Alle Hauptdiagonalelemente sind reell. Eine hermitesche Matrix ist z. B.

$$A = \begin{pmatrix} -7 & 3i & 1-4i \\ -3i & 2 & 8-i \\ 1+4i & 8+i & 6 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} -7 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 8 \\ 1 & 8 & 6 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 3i & -4i \\ -3i & 0 & -i \\ 4i & i & 0 \end{pmatrix}.$$

- Die Determinante einer hermiteschen Matrix ist reell:

$$\det A \in \mathbb{R}.$$

- Hermitesche Matrizen (**lineare hermitesche Operatoren**) besitzen nur **reelle Eigenwerte**.¹

In (2.4) verwenden wir für $\langle u|$

$$|u\rangle = A|v\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle u| = |u\rangle^\dagger = (A|v\rangle)^\dagger = \langle v|A^\dagger = \langle v|A$$

und erhalten

$$\langle u|v\rangle = \langle u|v\rangle^* = \langle v|A|v\rangle = (\langle v|A|v\rangle)^*.$$

Mit dem Eigenwert λ von A gilt die Eigenwertgleichung

$$A|v\rangle = \lambda|v\rangle,$$

woraus

$$\begin{aligned} \langle v|A|v\rangle &= \langle v|\lambda|v\rangle \\ &= \lambda\langle v|v\rangle = (\lambda\langle v|v\rangle)^* \end{aligned}$$

folgt. Wegen $\langle v|v\rangle \in \mathbb{R}$ muss also auch $\lambda \in \mathbb{R}$ gelten.

- Die **Eigenvektoren** zu *verschiedenen* Eigenwerten einer hermiteschen Matrix (einem linearen hermiteschen Operator) sind **orthogonal**.¹

„Sei

$$A|u\rangle = \lambda_1|u\rangle, \quad A|v\rangle = \lambda_2|v\rangle, \quad \lambda_1 \neq \lambda_2.$$

Aus der zweiten Gleichung folgt $\langle v|A = \lambda_2\langle v|$. Bildet man in dieser Gleichung das Skalarprodukt mit $|u\rangle$, in der ersten Gleichung das Skalarprodukt mit $\langle v|$ und subtrahiert anschließend die beiden Gleichungen voneinander, so erhält man

$$\langle v|A|u\rangle - \langle v|A|u\rangle = \lambda_1\langle v|u\rangle - \lambda_2\langle v|u\rangle,$$

also

$$(\lambda_1 - \lambda_2)\langle v|u\rangle = 0,$$

also $\langle v|u\rangle = 0$.“

¹Zitiert aus bzw. nach: Jan-Markus Schwindt, *Tutorium Quantenmechanik*, Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 2013, Seite 27 bis Seite 30.

- Die **Eigenvektoren** bezüglich einer hermiteschen Matrix (einem linearen hermiteschen Operator) spannen eine **vollständige Orthonormalbasis** (VON-Basis) in $\mathcal{H}$ auf.² Kurz gesagt, die Eigenvektoren aller Eigenwerte einer hermiteschen Matrix (eines hermiteschen Operators) spannen den gesamten zugehörigen Hilbert-Raum auf.
- Der Eigenvektor bzw. „die Eigenvektoren zu einem bestimmten Eigenwert λ bilden einen Vektorraum, einen Unterraum von $\mathcal{H}$, den Eigenraum $\mathcal{H}_\lambda$ zum Eigenwert λ .“² Insofern stellt jeder einzelne Eigenvektor einen eindimensionalen Unterraum von $\mathcal{H}$ dar.
- Jeder durch eine quantenmechanische Messung zu beschreibende Zustand eines Objekts ist mathematisch gesehen ein **Strahl** bzw. die Vektorenmenge $\{\alpha|\Psi\rangle\}$ mit $\alpha \in \mathbb{C}$ und folglich ein eindimensionaler Unterraum von $\mathcal{H}$. $|\Psi\rangle$ ist dabei der im Allgemeinen gemäß $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ normierte Zustandsvektor und kann als Repräsentant des zu beschreibenden Zustands gewählt werden. Die Zustandsvektoren (Zustände) $|\Psi\rangle$ wiederum sind im Allgemeinen Linearkombinationen aus Eigenvektoren $|a_i\rangle$ bezüglich einer Observablen, d. h. bezüglich eines Operators $\hat{A}$.

²Zitiert aus bzw. nach: Jan-Markus Schwindt, *Tutorium Quantenmechanik*, Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 2013, Seite 27 bis Seite 30.

5 Unitäre Matrizen (Operatoren)

Unitäre Operatoren bezeichnen wir mit $\hat{U}$ und die zugehörigen unitären Matrizen (Operatorenmatrizen) mit $(U_{ij}) = U$. Zwei sehr einfache Beispiele für unitäre Matrizen sind die Einheitsmatrix und $U = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Vereinfachend verwenden wir in diesem Abschnitt für die (Zustands-)Vektoren gelegentlich die Darstellung

$$\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_i \\ \vdots \end{pmatrix} =: |v\rangle .$$

5.1 Eigenschaften unitärer Matrizen (Operatoren)

- Unitär heißt im weitesten Sinne normerhaltend. Das aber bedeutet, dass $\hat{U}$ bzw. U auch das Skalarprodukt invariant lassen:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \Psi \rangle &\stackrel{!}{=} \langle \hat{U} \Phi | \hat{U} \Psi \rangle \\ &= \langle \Phi | \underbrace{\hat{U}^\dagger \hat{U}}_{\mathbb{1}} | \Psi \rangle \\ &= \langle \Phi | U^\dagger U | \Psi \rangle = \langle \Phi | \Psi \rangle . \end{aligned}$$

- Daraus folgt

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = U^\dagger U = \mathbb{1} \quad \Leftrightarrow \quad U^\dagger = U^{-1} , \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} .$$

- Damit ist U stets invertierbar und regulär.
- Inverse und Produkt unitärer Matrizen (Operatoren) sind unitär.
- Der Betrag der Determinante von U ist stets

$$|\det U| = 1 .$$

- Unitär im Komplexen entspricht orthogonal im Reellen, denn Zeilen und Spalten unitärer Matrizen (Operatoren) sind orthonormiert. Mit der unitären Matrix $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$ und der orthogonalen Matrix $O \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt das

$$U^\dagger U = U^{-1} U = \mathbb{1} \quad \longleftrightarrow \quad O^T O = O^{-1} O = \mathbb{1} .$$

- $|u_i\rangle$ seien die Eigenzustände bezüglich $\hat{U}$ und $\lambda_i \in \mathbb{C}$ die zugehörigen Eigenwerte. Aus der entsprechenden Eigenwertgleichung

$$\hat{U}|u_i\rangle = \lambda_i|u_i\rangle$$

erhalten wir das Skalarprodukt (gleicher Zeilen oder gleicher Spalten)

$$\begin{aligned}\langle \hat{U}u_i | \hat{U}u_i \rangle &= \langle u_i | U^\dagger U | u_i \rangle = \langle u_i | u_i \rangle = 1 \\ &= \langle \lambda_i u_i | \lambda_i u_i \rangle = \lambda_i^* \lambda_i \langle u_i | u_i \rangle = \langle u_i | u_i \rangle = 1 \\ \Rightarrow \quad \lambda_i^* \lambda_i &= |\lambda_i|^2 = 1 .\end{aligned}$$

Das Betragsquadrat jedes Eigenwerts λ_i des unitären Operators $\hat{U}$ bzw. der unitären Matrix U ist gleich 1.

5.2 Unitäre Transformation

Nach: Christian B. Lang und Norbert Pucker, *Mathematische Methoden in der Physik*, Hochschultaschenbuch, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1998, Seite 430 und Seite 431.

Bei der unitären Transformation wird durch eine unitäre Matrix (einen unitären Operator) ein normerhaltender Darstellungswechsel bewirkt. Die unitäre Transformation ändert also das Basissystem im Vektorraum z. B. im Sinne einer Drehung oder Spiegelung. Die Orthogonalitätseigenschaften des Basissystems bleiben dabei erhalten.

Analog zu einer Drehmatrix vermittelt so ein unitärer Operator $\hat{U}$ die unitäre Transformation zwischen den zwei verschiedenen Orthonormalbasen $\{|a_i\rangle\}$ und $\{|b_i\rangle\}$ gemäß

$$\hat{U}|a_i\rangle = |b_i\rangle . \quad (5.1)$$

Die Matrixelemente des unitären Operators $\hat{U}$ (s. Matrixdarstellung von Operatoren) sind damit

$$\langle a_i | \hat{U} | a_j \rangle = \langle a_i | b_j \rangle = U_{ij} .$$

Die Umkehroperation von (5.1) ist

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} | a_i \rangle = U^\dagger U | a_i \rangle = \hat{U}^\dagger | b_i \rangle = | a_i \rangle .$$

Ein Vektor $|v\rangle$ hat in den beiden verschiedenen Orthonormalbasen $\{|a_i\rangle\}$ und $\{|b_i\rangle\}$ die verschiedenen Komponentendarstellungen

$$\sum_i \alpha_i |a_i\rangle = |v\rangle \equiv |\widetilde{v}\rangle = \sum_i \beta_i |b_i\rangle .$$

Der Darstellungswechsel des Vektors $|v\rangle$ von der einen in die andere Orthonormalbasis mittels unitärer Transformation erfolgt in Komponentenschreibweise wie folgt:

$$\begin{aligned}\beta_j &= \langle b_j | v \rangle = \langle b_j | \sum_i \alpha_i | a_i \rangle \\ &= \sum_i \alpha_i \langle b_j | a_i \rangle \\ \beta_j &= \sum_i U_{ji}^* \alpha_i .\end{aligned} \quad (5.2)$$

Für die zu den U_{ij} adjungierten Matrixelementen haben wir dabei U_{ji}^* geschrieben, weil für die zu (U_{ij}) adjungierte Matrix $(U_{ij})^\dagger = (U_{ji})^* = (U_{ji}^*)$ gilt. Die Matrixelemente U_{ji}^* erhalten wir aus den Matrixelementen U_{ij} wie folgt:

$$\begin{aligned} U_{ij} &= \langle a_i | b_j \rangle && \text{mit Zeilenindex } i \text{ und Spaltenindex } j \\ \Rightarrow \quad \langle a_i | b_j \rangle^\dagger &= \langle a_i | b_j \rangle^* = \langle b_j | a_i \rangle \\ \Rightarrow \quad \langle b_j | a_i \rangle &= U_{ji}^* && \text{mit Zeilenindex } j \text{ und Spaltenindex } i . \end{aligned}$$

In Matrixschreibweise ist (5.2)

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \\ \vdots \\ \beta_j \\ \vdots \end{pmatrix} =: \widetilde{|v\rangle} = \hat{U}^\dagger |v\rangle := U^\dagger \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_i \\ \vdots \end{pmatrix} .$$

Die Darstellung einer Matrix bzw. eines Operators ändert sich ebenfalls bei einem Basiswechsel. Betrachten wir also die unitäre Transformation des Matrixelements A_{ij} eines Operators $\hat{A}$. Die Transformation erfolge von der Darstellung in der Basis $\{|b_i\rangle\}$ in die Darstellung in der Basis $\{|a_i\rangle\}$. Mit (5.1) und den Komponenten von $\hat{U}$ und $\hat{A}$ erhalten wir in Komponentenschreibweise

$$\begin{aligned} A_{ij} &= \langle b_i | \hat{A} | b_j \rangle = \langle \hat{U} a_i | \hat{A} | \hat{U} a_j \rangle = \langle a_i | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | a_j \rangle = (U^\dagger A U)_{ij} = \tilde{A}_{ij} \\ &= \sum_{k,l} (U^\dagger)_{ik} A_{kl} U_{lj} . \end{aligned} \quad (5.3)$$

Hierbei ist also A_{ij} das Matrixelement der Matrix A in der Basis $\{|b_i\rangle\}$ und $\tilde{A}_{ij}$ das Matrixelement der Matrix $\tilde{A}$ in der Basis $\{|a_i\rangle\}$. $U_{lj} = \langle a_l | b_j \rangle$, d. h. $|b_j\rangle$ in $|a_l\rangle$, ist die Projektion von $|b_j\rangle$ auf $|a_l\rangle$. In Matrixschreibweise ist schließlich (5.3) kurz

$$U^\dagger A U = \tilde{A} .$$

Dies entspricht dem basisfreien Operatorenprodukt

$$\hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \tilde{\hat{A}} .$$

Die unitäre Transformation von Polynomen $(A + B)$ erfolgt durch

$$\widetilde{(A + B)} = U^\dagger (A + B) U = U^\dagger (A U + B U) = U^\dagger A U + U^\dagger B U = \tilde{A} + \tilde{B}$$

und von Potenzreihen $(A \cdot B)$ durch

$$\widetilde{(A \cdot B)} = U^\dagger (A \cdot B) U = U^\dagger (A \cdot U U^\dagger \cdot B) U = U^\dagger A U \cdot U^\dagger B U = \tilde{A} \cdot \tilde{B} .$$

Merke!

Die unitäre Transformation von der Basis $\{|a_i\rangle\}$ in die Basis $\{|b_i\rangle\}$ erfolgt durch

$$\hat{U}|a_i\rangle = |b_i\rangle$$

mit der Umkehroperation $|a_i\rangle = \hat{U}^\dagger|b_i\rangle$.

Die unitäre Transformation eines Vektors $|v\rangle$ erfolgt durch

$$\hat{U}^\dagger|v\rangle = |\widetilde{v}\rangle$$

mit der Umkehroperation $|v\rangle = U|\widetilde{v}\rangle$.

Die unitäre Transformation einer Matrix A bzw. eines Operators $\hat{A}$ erfolgt durch

$$U^\dagger A U = \widetilde{A} \quad \longleftrightarrow \quad \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} = \widetilde{\hat{A}}$$

mit der Umkehroperation $A = U \widetilde{A} U^\dagger \quad \longleftrightarrow \quad \hat{A} = \hat{U} \widetilde{\hat{A}} \hat{U}^\dagger$.

Dabei ist $(A_{ij}) = A$ die zum Operator $\hat{A}$ gehörende und $(\widetilde{A}_{ij}) = \widetilde{A}$ die zum Operator $\widetilde{\hat{A}}$ gehörende Matrix. $U(\dots)U^\dagger$ ist die zu $U^\dagger(\dots)U$ inverse Operation.

5.3 Diagonalisierung von Matrizen (Operatoren)

Nach: Christian B. Lang und Norbert Pucker, *Mathematische Methoden in der Physik*, Hochschultaschenbuch, Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, Berlin, 1998, Seite 418 und Seite 419.

In diesem Abschnitt folgen wir im Wesentlichen der Argumentation von Lang und Pucker (s. Literaturhinweis). Wie wir in unseren bisherigen Betrachtungen über den Umgang mit Matrizen und Operatoren unter Berücksichtigung der Matrixdarstellung von Operatoren feststellen konnten, lassen sich die Ergebnisse für Matrizen mühelos auf Operatoren übertragen. Deshalb gehen wir jetzt vereinfachend nur von einer Matrix A aus.

Diese Matrix A habe die spezielle Eigenschaft, dass ihre Eigenvektoren $|v_i\rangle$ orthogonal aufeinander stehen und gleichzeitig auch eine zu A passende VON-Basis $\{|v_i\rangle\}$ bilden. Dies gilt stets für *hermitesche* und folglich auch für *symmetrische reelle* Matrizen. Selbstverständlich erfüllen diese Basisvektoren (Eigenvektoren) $|v_i\rangle$ die Eigenwertgleichung

$$A|v_i\rangle = \lambda_i|v_i\rangle.$$

Wenn wir aus den orthonormierten Eigen- bzw. Basisvektoren $|v_i\rangle$ eine Matrix bilden derart, dass die Basisvektoren die Spalten der Matrix darstellen, so erhalten wir die *unitäre* Matrix U sinngemäß durch

$$U := (|v_1\rangle \quad |v_2\rangle \quad \cdots \quad |v_i\rangle \quad \cdots),$$

denn wegen der Orthonormalität der $|v_i\rangle$ gemäß $\langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$ gilt

$$U^\dagger U = \begin{pmatrix} (v_1)_1^* & (v_1)_2^* & \cdots & (v_1)_j^* & \cdots \\ (v_2)_1^* & (v_2)_2^* & \cdots & (v_2)_j^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ (v_i)_1^* & (v_i)_2^* & \cdots & (v_i)_j^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (v_1)_1 & (v_2)_1 & \cdots & (v_i)_1 & \cdots \\ (v_1)_2 & (v_2)_2 & \cdots & (v_i)_2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\ (v_1)_j & (v_2)_j & \cdots & (v_i)_j & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \ddots \end{pmatrix} = \mathbb{1} \quad (5.4)$$

Wie man sieht, sind die Elemente der Matrix U die Entwicklungskoeffizienten $(v_i)_j$ der Eigenvektoren $|v_i\rangle$ in einer anderen VON-Basis, z. B. $\{|a_j\rangle\}$:

$$|v_i\rangle = \sum_j \langle a_j|v_i\rangle |a_j\rangle = \sum_j (v_i)_j |a_j\rangle := \begin{pmatrix} (v_i)_1 \\ (v_i)_2 \\ \vdots \\ (v_i)_j \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Wären die $|a_j\rangle$ selbst die Eigenvektoren zur Matrix A , hätte U die Gestalt einer Diagonalmatrix.

Jetzt multiplizieren wir U in (5.4) mit der Matrix A .¹ Entsprechend der Eigenwertgleichung

$$A|v_i\rangle = \lambda_i |v_i\rangle := \lambda_i \begin{pmatrix} (v_i)_1 \\ (v_i)_2 \\ \vdots \\ (v_i)_j \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_i (v_i)_1 \\ \lambda_i (v_i)_2 \\ \vdots \\ \lambda_i (v_i)_j \\ \vdots \end{pmatrix}$$

bezüglich der Eigenvektoren (Spalten) $|v_i\rangle$ von U gilt für die Elemente der resultierenden Matrix $U^\dagger A U$, d. h. für „Zeile k von $U^\dagger$ mal λ_i mal Spalte i von U “

$$\sum_j (v_k)_j^* \lambda_i (v_i)_j = \lambda_i \sum_j (v_k)_j^* (v_i)_j = \lambda_i \delta_{ki},$$

sodass

$$U^\dagger A U = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_i & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} = A.$$

Die Hauptdiagonalelemente der Diagonalmatrix A sind die Eigenwerte der Matrix A .

¹Die Multiplikation der Matrix U mit der Matrix A entspricht der Wirkung des Operators $\hat{A}$ auf den unitären Operator $\hat{U}$.

Damit haben wir ein Verfahren zur Diagonalisierung von hermiteschen bzw. symmetrischen reellen Matrizen A (Operatoren $\hat{A}$) gefunden:

1. Wir bilden die orthonormierten Eigenvektoren $|v_i\rangle$ zu A (zu $\hat{A}$).
2. Diese Eigenvektoren bilden die Spalten der unitären Matrix U . Auf die Reihenfolge der Eigenvektoren bzw. Spalten ist zu achten. Sie ist nicht beliebig, denn eine Vertauschung der Reihenfolge der Eigenvektoren $|v_i\rangle$ in U bewirkt eine entsprechende Vertauschung der Reihenfolge der Diagonalelemente λ_i in Λ .
3. Das Matrixprodukt $U^\dagger A U$ bewirkt dann die Diagonalisierung von A und liefert die Diagonalmatrix Λ , deren Hauptdiagonalelemente die Eigenwerte λ_i von A (von $\hat{A}$) sind.

Beispiel

Betrachten wir die hermitesche Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 8 & -3i \\ 3i & 0 \end{pmatrix}.$$

Ihre Eigenwerte sind

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 4 + \sqrt{16 + 9} = 9, \\ \lambda_2 &= 4 - \sqrt{16 + 9} = -1, \end{aligned}$$

also erwartungsgemäß reell. Die (normierten) Eigenvektoren zu A sind

$$|v_1\rangle_{(\lambda_1)} := \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 3 \\ i \end{pmatrix},$$

$$|v_2\rangle_{(\lambda_2)} := \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} i \\ 3 \end{pmatrix}.$$

$|v_1\rangle$ und $|v_2\rangle$ sind tatsächlich orthogonal, denn

$$\langle v_1 | v_2 \rangle = \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} 3 \\ i \end{pmatrix}^\dagger \cdot \frac{1}{\sqrt{10}} \begin{pmatrix} i \\ 3 \end{pmatrix} = \frac{1}{10} (-3i + 3i) = 0.$$

Die Eigenvektoren sind die Spalten der unitären Matrix U , die A wie folgt diagonalisiert:

$$U^\dagger A U = \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{-i}{\sqrt{10}} \\ \frac{-i}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 8 & -3i \\ 3i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{i}{\sqrt{10}} \\ \frac{i}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} = \Lambda.$$

Die Umkehroperation dazu ist

$$U \Lambda U^\dagger = U (U^\dagger A U) U^\dagger = U U^\dagger A U U^\dagger = \mathbb{1} A \mathbb{1} = A.$$

Eine Änderung der Reihenfolge der Eigenvektoren $|v_i\rangle$ in U bewirkt eine entsprechende Änderung der Reihenfolge der Diagonalelemente λ_i in Λ :

$$\begin{pmatrix} |v_2\rangle & |v_1\rangle \end{pmatrix} =: \check{U} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{10}} & \frac{3}{\sqrt{10}} \\ \frac{3}{\sqrt{10}} & \frac{i}{\sqrt{10}} \end{pmatrix} \Rightarrow \check{U}^\dagger A \check{U} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_2 & 0 \\ 0 & \lambda_1 \end{pmatrix}.$$

6 Spur einer Matrix

- Die Spur einer Matrix A ist die Summe ihrer Hauptdiagonalelemente. Für die Darstellung der Spur in der VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$ gilt somit

$$\text{Sp}\{A\} = \sum_i \langle a_i | A | a_i \rangle = \sum_i A_{ii} .$$

- Die Spur einer Matrix ist unabhängig von der verwendeten VON-Basis (hier $\{|a_i\rangle\}$ und $\{|b_k\rangle\}$) von $\mathcal{H}$:

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{A\} &= \sum_i \langle a_i | A | a_i \rangle \\ &= \sum_i \sum_{k,l} \langle a_i | b_k \rangle \langle b_k | A | b_l \rangle \underbrace{\langle b_l | a_i \rangle}_{=1} \\ &= \sum_i \sum_{k,l} \underbrace{\langle b_l | a_i \rangle}_{=1} \langle a_i | b_k \rangle \langle b_k | A | b_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} \langle b_l | \left(\underbrace{\sum_i |a_i\rangle \langle a_i|}_{=1} \right) | b_k \rangle \langle b_k | A | b_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} \underbrace{\langle b_l | b_k \rangle}_{\delta_{kl}} \langle b_k | A | b_l \rangle \\ &= \sum_{k,l} \delta_{kl} \langle b_k | A | b_l \rangle \\ \text{Sp}\{A\} &= \sum_k \langle b_k | A | b_k \rangle . \quad \square \end{aligned}$$

- Die zyklische Invarianz der Spur:

Zunächst zeigen wir

$$\text{Sp}\{AB\} = \text{Sp}\{BA\} :$$

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{AB\} &= \sum_i \langle a_i | AB | a_i \rangle = \sum_{i,k} \langle a_i | A | a_k \rangle \langle a_k | B | a_i \rangle \\ &= \sum_k \sum_i \langle a_k | B | a_i \rangle \langle a_i | A | a_k \rangle \\ &= \sum_k \langle a_k | BA | a_k \rangle = \text{Sp}\{BA\} . \quad \square \end{aligned}$$

Daraus folgt die zyklische Invarianz der Spur

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{A \cdot BC\} &= \text{Sp}\{BC \cdot A\} \\ &= \text{Sp}\{B \cdot CA\} = \text{Sp}\{CA \cdot B\} \end{aligned}$$

und für die unitäre Transformation der Spur einer Matrix A

$$\text{Sp}\{\tilde{A}\} = \text{Sp}\{U^\dagger A U\} = \text{Sp}\{\underbrace{U U^\dagger}_{=1} A\} = \text{Sp}\{A\} .$$

•

$$\text{Sp}\{AB\} = \sum_{i,j} A_{ij} B_{ji} \neq \text{Sp}\{A\} \cdot \text{Sp}\{B\} = \sum_i A_{ii} \cdot \sum_j B_{jj} .$$

• Spur des dyadischen Produkts

$$D = |u\rangle\langle v| , \quad |u\rangle \text{ orthogonal zu } |v\rangle \quad \Rightarrow \quad \langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle = 0 :$$

$$\begin{aligned} \text{Sp}\{D\} &= \sum_i \langle a_i|u\rangle \langle v|a_i\rangle \\ &= \sum_i \langle v|a_i\rangle \langle a_i|u\rangle = \langle v| \underbrace{\sum_i |a_i\rangle \langle a_i|}_{=1} |u\rangle \end{aligned}$$

$$\text{Sp}\{D\} = \langle v|u\rangle = 0 .$$

Veranschaulichendes Beispiel:

$$D = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \quad 0 \quad 1) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{Sp}\{D\} = 0 .$$

7 Das quantenmechanische Messproblem

7.1 Observable, Messvorgang und Messergebnis

Nach: Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 130 bis Seite 137 und Seite 180 bis Seite 183.

Die zu messende physikalische bzw. quantenmechanische Größe bezeichnet man als **Observable**. Sie ist eine „quantendynamische Variable (Operator) mit direkt beobachtbaren, reellen Messwerten.“¹ Im Folgenden werden wir die basisfreien Operatoren zur besseren Unterscheidung mit einem Dach kennzeichnen wie z. B. beim Operator $\hat{A}$.

Eine **Messung** impliziert notwendigerweise die Wechselwirkung zwischen der Messapparatur und dem zu messenden System. Außerdem muss die Messapparatur zur Messung der Observablen geeignet sein. Mathematisch gesehen entspricht der Messvorgang der Anwendung eines linearen hermiteschen Operators $\hat{A}$ auf einen Zustandsvektor (kurz Zustand) $|\Psi\rangle$ des Systems. In der Quantenmechanik lassen sich diese Operatoren $\hat{A}$ als die Observablen identifizieren. Anders gesagt, die Operatoren werden auch als Observablen bezeichnet. Weiterhin bezeichnen wir im Folgenden die Eigenwerte von $\hat{A}$ mit λ_i und die Eigenvektoren bezüglich $\hat{A}$ mit $|a_i\rangle$. Letztere sollen eine vollständige Orthonormalbasis $\{|a_i\rangle\}$ in dem zu $\hat{A}$ passenden Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ aufspannen. Weiterhin nehmen wir vereinfachend an, $|\Psi\rangle$ sei ein reiner Systemzustand. Warum $|\Psi\rangle$ ein **reiner Zustand** ist, werden wir verstehen, wenn wir im nächsten Abschnitt die gemischten Zustände kennenlernen.

Weil in der Quantenmechanik wegen der Heisenberg’schen Unschärferelation die Orte $\vec{x}$ und die Impulse $\vec{p}$ der Phasenraumpunkte $\vec{\pi} = (\vec{x}, \vec{p})$ nicht gleichzeitig scharf sein können, haben wir es in der Quantenmechanik mit Zustandsvektoren und Erwartungswerten zu tun. Zustandsvektoren sind im Allgemeinen Linearkombinationen von Eigenvektoren bezüglich einer Observablen. Bei der Messung einer Observablen an einem System, dessen Zustand durch einen Zustandsvektor beschrieben wird, resultiert ein (reeller) Eigenwert der Observablen. Bei der Messung hat folglich das System den zum gemessenen Eigenwert gehörenden Eigenzustand angenommen und der ursprüngliche Zustand des Systems ist vernichtet. Das Ergebnis der Einzelmessung ist in der Regel nicht vorhersagbar. Bestimmte Messwerte (Eigenwerte) realisieren sich bei der Messung mit einer zugehörigen bestimmten Wahrscheinlichkeit, die sich aus den Eigenfunktionen zur Observablen ergibt. Der quantenmechanische Mittelwert aus allen möglichen Messwerten unter Berücksichtigung ihrer Wahrscheinlichkeit heißt Erwartungswert.

Wir werden jetzt das mathematische Modell des quantenmechanischen Messvorgangs am reinen Zustand $|\Psi\rangle$ entwickeln. Der quantenmechanische Messvorgang erfolgt in zwei Schritten, der Spektralzerlegung und der Zustandsreduktion von $|\Psi\rangle$.

¹Zitiert aus: Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 137.

Spektralzerlegung des reinen Zustands $|\Psi\rangle$

Zu Beginn des Messvorgangs zerlegt die Messapparatur den Zustand $|\Psi\rangle$ in alle seine Komponenten $c_i|a_i\rangle$ parallel zu den Eigenzuständen (Eigenvektoren) $|a_i\rangle$ bezüglich $\hat{A}$. Die $c_i = \langle a_i|\Psi\rangle$, $c_i \in \mathbb{C}$, sind die Entwicklungskoeffizienten von $|\Psi\rangle$. Mathematisch betrachtet bewirkt hierbei der Operator $\hat{A}$ diese Spektralzerlegung des Zustands $|\Psi\rangle$ wie folgt:

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_i \lambda_i \underbrace{\langle a_i|\Psi\rangle}_{c_i} |a_i\rangle = \sum_i \lambda_i |a_i\rangle \langle a_i|\Psi\rangle \quad (7.1)$$

$$\hat{A}|\Psi\rangle = \sum_i c_i \cdot \lambda_i |a_i\rangle \quad (7.2)$$

(7.1) ist eine Summe aus Vektoren, die alle parallel zu den Basisvektoren bzw. Eigenzuständen von $\hat{A}$ verlaufen. $|\Psi\rangle$ ist also die Linearkombination aus den Vektoren $\langle a_i|\Psi\rangle |a_i\rangle$ gemäß der Entwicklung $|\Psi\rangle = \sum_i \langle a_i|\Psi\rangle |a_i\rangle$. Aus dem Vergleich von linker und rechter Seite der Gleichung (7.1) entnehmen wir mit $\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \mathbb{1}$

$$\hat{A} = \sum_i \lambda_i |a_i\rangle \langle a_i| = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & \\ & \lambda_2 & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_i & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Dies ist die Spektraldarstellung des linearen hermiteschen Operators $\hat{A}$ oder kurz das Spektrum von $\hat{A}$, also die Gesamtheit aller Eigenwerte λ_i von $\hat{A}$ dargestellt als Diagonalmatrix.

Zustandsreduktion

Jede Messung kann nur *einen* Wert ergeben. Deshalb wird der Messvorgang abgeschlossen, indem ein Zustand mit dem zugehörigen Eigenwert λ_i als Messwert aus dem Spektrum (7.2) „herausgefiltert“ wird. Mathematisch erfolgt diese Zustandsreduktion durch den Projektionsoperator $P_i = |a_i\rangle \langle a_i|$ wie folgt:

$$\begin{aligned} P_i|\Psi\rangle &= |a_i\rangle \langle a_i| \sum_j \underbrace{\langle a_j|\Psi\rangle}_{c_j} |a_j\rangle \\ &= |a_i\rangle \langle a_i| \sum_j |a_j\rangle c_j \\ &= \sum_j |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i|a_j\rangle}_{\delta_{ij}} c_j \\ P_i|\Psi\rangle &= c_i |a_i\rangle. \end{aligned}$$

Welcher der Zustände $|a_i\rangle$ bei der Zustandsreduktion herausgefiltert und welcher zugehörige Eigenwert λ_i dabei gemessen wird, ist nicht vorhersagbar. Allerdings lassen sich die Wahrscheinlichkeiten des Auftretens der einzelnen Zustände $|a_i\rangle$ mit den zugehörigen Messwerten λ_i aus den Entwicklungskoeffizienten c_i exakt berechnen. Die

Entwicklungskoeffizienten werden deshalb auch als Wahrscheinlichkeitsamplituden bezeichnet. Jede Einzelmessung ergibt nämlich mit der bestimmten, naturgegebenen Wahrscheinlichkeit

$$p_i = c_i^* c_i = |c_i|^2 = \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \Psi \rangle$$

den zugehörigen Eigen- bzw. Messwert λ_i , sodass die Wahrscheinlichkeit, überhaupt einen Wert aus dem Eigenwertspektrum $\{\lambda_i\}$ der Observablen $\hat{A}$ zu messen, erwartungsgemäß

$$\sum_i p_i = \sum_i c_i^* c_i = \sum_i |c_i|^2 = \sum_i \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \Psi \rangle = 1$$

ist.

Abschließend bilden wir noch den Erwartungswert der Observablen $\hat{A}$. In der Quantenmechanik wird der Mittelwert über die N Messwerte einer Messreihe bezüglich einer Observablen für $N \rightarrow \infty$ Erwartungswert genannt. Der Erwartungswert von $\hat{A}$ ist

$$\begin{aligned} \langle \hat{A} \rangle &= \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle \\ &= \sum_{i,j} \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \langle a_j | \Psi \rangle \\ &= \sum_{i,j} c_i^* \langle a_i | \lambda_j | a_j \rangle c_j \\ &= \sum_{i,j} c_i^* \lambda_j \underbrace{\langle a_i | a_j \rangle}_{\delta_{ij}} c_j \\ &= \sum_i c_i^* c_i \cdot \lambda_i = \sum_i |c_i|^2 \cdot \lambda_i \\ \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i p_i \cdot \lambda_i . \end{aligned} \tag{7.3}$$

An (7.3) erkennt man, dass das Betragsquadrat $c_i^* c_i = |c_i|^2$ der Entwicklungskoeffizienten c_i die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten der zugehörigen Messwerte λ_i ist.

Im Fall **reiner Zustände** $|\Psi\rangle$ existieren *vollständige Informationen* über das durch Messungen seiner Observablen zu beschreibende System. Und dennoch treten die möglichen Messwerte λ_i nur mit einer bestimmten, **prinzipiell-quantenmechanischen**, aber exakt berechenbaren **Wahrscheinlichkeit** auf. Dieser Sachverhalt ist Ausdruck des *spezifisch-quantenmechanischen Indeterminismus*.

7.2 Gemischte Zustände

Nach: Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 6, Statistische Physik*, 5. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2005, Seite 103 und Seite 104.

Im Unterschied zu reinen Zuständen existieren bei den gemischten Zuständen $|\Phi\rangle$ nur *unvollständige Informationen* über das durch die Messung seiner Observablen $\hat{A}$ zu beschreibende System. Unter dieser Bedingung befindet sich das System jeweils mit

der Wahrscheinlichkeit w_n in einem der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Diese angenommenen reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$ seien orthonormiert, aber *nicht* notwendigerweise die Eigenzustände zur Observablen $\hat{A}$. Die Eigenzustände bezüglich $\hat{A}$ bilden die VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$.

Die Wahrscheinlichkeiten w_n sind hier, z. B. durch äußere Einflüsse bzw. Messfehler bedingt, rein klassisch-statistischer und nicht grundsätzlicher (prinzipieller) Natur. Sie resultieren also aus der Unvollständigkeit der Information und wären prinzipiell vermeidbar – im Gegensatz zu den prinzipiell-quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten infolge des spezifisch-quantenmechanischen Indeterminismus.

Ein gemischter, normierter Zustand $|\Phi\rangle$ werde also repräsentiert von der Gesamtheit der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$ jeweils mit ihrer statistischen Wahrscheinlichkeit w_n , sodass für den Erwartungswert von $\hat{A}$ gilt:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{A} \rangle &= \langle \Phi | \hat{A} | \Phi \rangle = \sum_n w_n \langle \Psi_n | \hat{A} | \Psi_n \rangle \\
&= \sum_n w_n \sum_{i,j} \underbrace{\langle \Psi_n | a_i \rangle}_{c_{in}^*} \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \underbrace{\langle a_j | \Psi_n \rangle}_{c_{jn}} \\
&= \sum_n w_n \sum_{i,j} c_{in}^* c_{jn} \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \\
&\quad \text{mit } \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle = \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle \delta_{ij} = \lambda_j \langle a_i | a_j \rangle = \lambda_j \delta_{ij} \\
&\quad \Rightarrow \langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle = \lambda_i \\
&= \sum_n w_n \sum_i |c_{in}|^2 \lambda_i \\
&= \sum_i \lambda_i \cdot \sum_n w_n \cdot |c_{in}|^2 \\
&= \sum_i \lambda_i \cdot \underbrace{\sum_n w_n \cdot p_{in}}_{W_i} \\
\langle \hat{A} \rangle &= \sum_i W_i \cdot \lambda_i \\
&\quad \text{oder} \\
\langle \hat{A} \rangle &= \sum_i W_i \langle a_i | \hat{A} | a_i \rangle .
\end{aligned}$$

Die Wahrscheinlichkeit

$$W_i = \sum_n w_n \cdot p_{in} ,$$

mit der die Messwerte λ_i des gemischten Zustands $|\Phi\rangle$ auftreten (*bei Messung am gemischten Zustand*), setzt sich also aus zwei verschiedenen Wahrscheinlichkeiten zusammen. Darin ist

$$p_{in} = |c_{in}|^2 = |\langle a_i | \Psi_n \rangle|^2$$

die prinzipiell-quantenmechanische Wahrscheinlichkeit für das Auftreten des Messwertes λ_i bezüglich der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$ (*bei Messung am reinen Zustand*) und die

w_n sind die klassisch-statistischen Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$.

Entsprechend beinhaltet der Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ der Observablen $\hat{A}$ in einem gemischten Zustand zwei verschiedene Mittelungen.

Die erste Mittelung ist die rein-quantenmechanische Mittelung:

- Sie ist prinzipieller Natur.
- Sie erfolgt direkt auf der Grundlage reiner Zustände bzw. der quantenmechanischen Wahrscheinlichkeitsamplituden (Entwicklungskoeffizienten)
 $c_{in} \in \mathbb{C} \Rightarrow$
- Die daraus resultierenden Zustände können miteinander interferieren.

Die zweite Mittelung ist die klassische Mittelung:

- Sie ist praktischer Natur. Die diesbezüglichen Abweichungen vom Mittelwert wären im Prinzip durch den Ausschluss von Messfehlern vermeidbar.
- Sie „greift dagegen direkt Erwartungswerte und nicht Zustände an“², erfolgt also auf der Grundlage der klassisch-statistischen Wahrscheinlichkeiten
 $w_n \in \mathbb{R} \Rightarrow$
- Die Folge davon ist, „dass die verschiedenen reinen Zustände $|\Psi_m\rangle$ des Gemisches nicht miteinander interferieren. Der gemischte Zustand resultiert also aus einer inkohärenten Superposition von reinen Zuständen.“²

7.3 Der statistische Operator (Dichtematrix)

Nach:

Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 189 bis Seite 194
und

Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 6, Statistische Physik*, 5. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2005, Seite 104 bis Seite 106.

Von besonderer Bedeutung für die Bestimmung der Erwartungswerte und für die Quantenstatistik ist der statistische Operator

$$\hat{\varrho} = \sum_n w_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n|,$$

der auch kurz Dichtematrix genannt wird. Die Zustände $|\Psi_n\rangle$ seien die gleichen wie im Abschnitt 7.2, also reine, orthonormierte Zustandsvektoren gemäß $\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle = \delta_{mn}$, aber nicht notwendigerweise Eigenzustände zum Operator $\hat{A}$. Wir leiten $\hat{\varrho}$ aus dem quantenmechanischen Erwartungswert der Observablen bzw. des Operators $\hat{A}$ in einem gemischten Zustand $|\Phi\rangle$ her, d. h. für ein statistisches Ensemble. Der gemischte Zustand $|\Phi\rangle$ wird repräsentiert durch die reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$, die jeweils mit ihrer klassisch-statistischen Wahrscheinlichkeit w_n auftreten. Die reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$

²Zitiert aus: Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 191.

können entwickelt werden nach den Eigenzuständen $|a_i\rangle$ zum Operator $\hat{A}$. Bezüglich der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$ treten die zu den Eigenzuständen $|a_i\rangle$ gehörenden Mess- bzw. Eigenwerte λ_i mit der prinzipiellen, quantenmechanischen Wahrscheinlichkeit $p_{in} = |c_{in}|^2$ auf.

Bei der Bestimmung des Erwartungswerts von $\hat{A}$ im gemischten Zustand ermöglicht der statistische Operator $\hat{\rho}$ die Zusammenfassung der quantenmechanischen mit der klassischen Mittelungsprozedur und liefert so den Erwartungswert $\langle\hat{A}\rangle$ aus den Eigenwerten λ_i , die dann jeweils mit der kombinierten Wahrscheinlichkeit $W_i = \sum_n w_n \cdot p_{in}$ auftreten:

$$\begin{aligned}
\langle\hat{A}\rangle &= \underbrace{\sum_n w_n}_{\text{klass. Mittel.}} \underbrace{\langle\Psi_n|\hat{A}|\Psi_n\rangle}_{\substack{\text{qm. Mittel.} \\ \begin{smallmatrix} \downarrow & \downarrow \\ 1 & 1 \end{smallmatrix} \\ \text{Zahl} \quad \text{Zahl} \quad \text{Zahl}}} \\
&= \sum_n w_n \sum_{i,j} \underbrace{\langle\Psi_n|a_i\rangle}_{\text{Zahl}} \underbrace{\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle}_{\text{Zahl}} \underbrace{\langle a_j|\Psi_n\rangle}_{\text{Zahl}} \\
&\quad \text{Zahlen sind beliebig vertauschbar} \quad \Rightarrow \\
&= \sum_n w_n \sum_{i,j} \langle a_j|\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|a_i\rangle \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle a_j| \underbrace{\sum_n w_n |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n|}_{\hat{\rho}} a_i\rangle \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle \\
&= \sum_{i,j} \langle a_j|\hat{\rho}|a_i\rangle \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle = \sum_{i,j} \langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle \langle a_j|\hat{\rho}|a_i\rangle \\
\langle\hat{A}\rangle &= \sum_j \langle a_j|\hat{\rho}\hat{A}|a_j\rangle = \sum_i \langle a_i|\hat{A}\hat{\rho}|a_i\rangle
\end{aligned}$$

$$\langle\hat{A}\rangle = \text{Sp}\{\hat{\rho}\hat{A}\} = \text{Sp}\{\hat{A}\hat{\rho}\}$$

Eigenschaften des statistischen Operators

1. $\hat{\varrho}$ ist hermitesch, weil der Projektionsoperator $|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|$ hermitesch ist und die Wahrscheinlichkeiten w_n reell sind:

$$\hat{\varrho} = \hat{\varrho}^\dagger .$$

2. Mit $\hat{A} = \mathbb{1}$ folgt

$$\text{Sp}\{\hat{\varrho}\hat{A}\} = \text{Sp}\{\hat{\varrho}\mathbb{1}\} = \sum_n w_n \langle\Psi_n|\Psi_n\rangle = \sum_n w_n = 1 ,$$

$$\boxed{\text{Sp}\{\hat{\varrho}\} = 1} .$$

3. $\hat{\varrho}$ bzw. der Erwartungswert von $\hat{\varrho}$ sind nicht-negativ:

$$\begin{aligned} \langle\Phi|\hat{\varrho}|\Phi\rangle &= \langle\Phi|\sum_n w_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Phi\rangle = \sum_n w_n \langle\Phi|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|\Phi\rangle \\ &= \sum_n w_n |\langle\Psi_n|\Phi\rangle|^2 \geq 0 . \quad \square \end{aligned}$$

4. $\hat{\varrho}^2$ (Operatorquadrat) in gemischten Zuständen bzw. in gemischter Gesamtheit:

$$\begin{aligned} \hat{\varrho} &= \sum_n w_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| , \\ \hat{\varrho}^2 &= \sum_{m,n} w_m w_n |\Psi_m\rangle\langle\Psi_m|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \\ &\quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\delta_{mn}} \\ \hat{\varrho}^2 &= \sum_n w_n^2 |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| \\ \Rightarrow \text{Sp}\{\hat{\varrho}^2\} &= \sum_n w_n^2 < \sum_n w_n = 1 , \end{aligned}$$

$$\boxed{0 < \text{Sp}\{\hat{\varrho}^2\} < 1} .$$

5. $\hat{\varrho}^2$ (Operatorquadrat) in reinen Zuständen bzw. in reiner Gesamtheit:

Der reine Zustand $|\Psi\rangle$ einer reinen Gesamtheit besitzt die klassisch-statistische Wahrscheinlichkeit $w_n = w = 1$, sodass

$$\begin{aligned} \hat{\varrho} &= |\Psi\rangle\langle\Psi| , \\ \hat{\varrho}^2 &= |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\varrho} \\ &\quad \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{=1} \\ \Rightarrow \text{Sp}\{\hat{\varrho}^2\} &= \sum_n w_n^2 = w^2 = 1 , \end{aligned}$$

$$\boxed{\text{Sp}\{\hat{\varrho}^2\} = 1} .$$

6. Die zeitliche Entwicklung von $\hat{\varrho}$ mit dem Hamilton-Operator $\hat{H} = \hat{H}^\dagger$, der zeitabhängigen Schrödinger-Gleichung

$$i\hbar \frac{d|\Psi\rangle}{dt} = i\hbar |\dot{\Psi}\rangle = \hat{H} |\Psi\rangle$$

und ihrer Adjungierten

$$-i\hbar \frac{d\langle\Psi|}{dt} = -i\hbar \langle\dot{\Psi}| = \langle\Psi|\hat{H} :$$

$$\begin{aligned} i\hbar \dot{\hat{\varrho}}(t) &= i\hbar \frac{d}{dt} \sum_n w_n |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| \\ &= \sum_n w_n \overbrace{\left(i\hbar |\dot{\Psi}_n\rangle \langle\Psi_n| + i\hbar |\Psi_n\rangle \langle\dot{\Psi}_n| \right)}^{\text{durch Produktregel}} \\ &= \sum_n w_n \left(\hat{H} |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| - |\Psi_n\rangle \langle\Psi_n| \hat{H} \right) \\ i\hbar \dot{\hat{\varrho}}(t) &= \hat{H} \hat{\varrho}(t) - \hat{\varrho}(t) \hat{H} \quad (\text{Kommutator}) . \end{aligned} \tag{7.4}$$

(7.4) ist die Von-Neumann-Gleichung

$$\boxed{\dot{\hat{\varrho}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\varrho}(t) \right]_-} .$$

Die Von-Neumann-Gleichung ist das quantenmechanische Analogon zur Liouville-Gleichung der klassischen statistischen Mechanik.

8 Randbedingungen

Wir wollen einige Überlegungen zu den Randbedingungen bei der Lösung von Wellengleichungen anstellen. Vereinfachend verwenden wir dabei statt des Impulses p die Wellenzahl $k = \frac{1}{\hbar} p$. Die Ersetzung von p durch k hat ihren Ursprung in der de Broglie-Gleichung

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k$$

und führt auf

$$\begin{aligned} dp = \hbar dk & \longleftrightarrow dk = \frac{1}{\hbar} dp, \\ \frac{1}{2\pi} \int dk \dots & \longleftrightarrow \frac{1}{2\pi} \int \frac{1}{\hbar} dp \dots = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp \dots \end{aligned}$$

Es gibt im Wesentlichen zwei Möglichkeiten zur Festlegung der Randbedingungen.

- Das betrachtete System, z. B. ein quaderförmiger Potentialtopf oder ein Festkörper, besitze feste Grenzen im Sinne eines Anfangs und eines Endes hinsichtlich der Wellenausbreitung.

L sei die Länge, die der Wellenausbreitung zur Verfügung steht. Für stehende Wellen mit den Wellenzahlen k_n und festen Enden ergeben sich dann folgende Bedingungen:

$$L = n \cdot \frac{\lambda_n}{2}, \quad k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} \quad \Leftrightarrow \quad \lambda_n = \frac{2\pi}{k_n},$$

$$L = n \cdot \frac{\pi}{k_n} \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{\pi}{L} \cdot n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad \Rightarrow \quad k_{n+1} - k_n = \frac{\pi}{L}. \quad (8.1)$$

- Das betrachtete System, z. B. auf einer Kugeloberfläche, besitze zwar eine endliche räumliche Ausdehnung, sei aber hinsichtlich der Wellenausbreitung nicht begrenzt, sodass der räumliche Anfang und das räumliche Ende des „Wellenumlaufs“ ineinander übergehen.

Es wird deshalb die *periodische Randbedingung* für die Lösungen Ψ der Wellengleichungen (z. B. der Schrödinger-Gleichung) festgelegt gemäß:

$$\Psi(x) = \Psi(x + L) \quad \Rightarrow \quad \text{z. B. } e^{ikx} = e^{ik(x+L)} = e^{i(kx+kL)}.$$

Diese Bedingung ist nur erfüllt für

$$kL = n \cdot 2\pi = k_n L, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$

Im Unterschied zu (8.1) folgt daraus

$$L = n \cdot \frac{2\pi}{k_n} \quad \Rightarrow \quad k_n = \frac{2\pi}{L} \cdot n \quad \Rightarrow \quad k_{n+1} - k_n = \frac{2\pi}{L}. \quad (8.2)$$

9 Dirac-Formalismus

Nach: Wolfgang Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik 5/1, Quantenmechanik – Grundlagen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2004, Seite 147 bis Seite 151.

Literaturtip: Cornelius C. Noack, *Hilbertraum–Kompendium für Physiker zum Gebrauch neben der Vorlesung*, Mathematik zur Quantentheorie, Universität Bremen, Institut für Theoretische Physik, 2003.

9.1 Übergang Hilbert-Vektor – Dirac-Vektor

Um von Anfang an Klarheit zu schaffen, werde schon an dieser Stelle folgendes festgestellt:

- **Hilbert-Vektoren** sind abzählbar, also diskret, und werden auch **eigentliche Zustandsvektoren** genannt.
- Hilbert-Vektoren lassen sich darstellen durch ihre Entwicklungskoeffizienten (Skalarprodukte) in einer abzählbaren (diskreten) VON-Basis, die den Hilbert-Raum aufspannt.
- Dirac-Vektoren sind nicht abzählbar, also kontinuierlich.
- **Dirac-Vektoren** sind keine Elemente des Hilbert-Raums. Sie werden entwickelt nach einer kontinuierlichen Basis und werden deshalb auch **uneigentliche Zustandsvektoren** genannt.
- Dirac-Vektoren sind auf δ -Funktionen normiert.
- Die Menge der eigentlichen Zustandsvektoren (Hilbert-Vektoren) und die Menge der uneigentlichen Zustandsvektoren (Dirac-Vektoren) bilden gemeinsam den **erweiterten Hilbert-Raum**.

Wir werden uns in diesem Abschnitt den Übergang von den (diskreten) Hilbert-Vektoren zu den (kontinuierlichen) Dirac-Vektoren erarbeiten. Dabei gehen wir von der Entwicklung des Hilbert-Vektors $|\Psi\rangle$ nach der VON-Basis $\{|v_i\rangle\}$ aus:

$$|\Psi\rangle = \sum_i |v_i\rangle \langle v_i | \Psi \rangle = \sum_i c_i \cdot |v_i\rangle = \sum_i \Psi_i \cdot |v_i\rangle .$$

Wie wir bereits festgestellt hatten, sind die Entwicklungskoeffizienten c_i Skalarprodukte bzw. skalare Vektorkomponenten und ihre Betragsquadrate $|c_i|^2$ sind die Wahrscheinlichkeiten für das Auftreten des Hilbert-Vektors $|\Psi\rangle$ bezüglich der Basisvektoren $|v_i\rangle$ mit $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Aus didaktischen Gründen werden wir im Folgenden für die Entwicklungskoeffizienten $c_i = \langle v_i | \Psi \rangle$

$$c_i = \Psi_i$$

schreiben, weil wir sehen werden, dass die (diskreten) Ψ_i in die (kontinuierlichen) Dirac-Vektoren $\Psi(x)$ übergehen, also den Wahrscheinlichkeitsamplituden $\Psi(x)$ entsprechen.

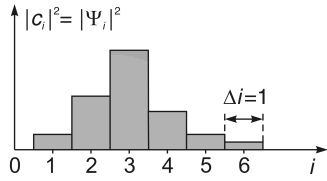


Abb. 9.1 Die Betragsquadrate $|\Psi_i|^2$, d.h. die Wahrscheinlichkeiten des Zustands $|\Psi\rangle$, sind in Form eines Histogramms über den zugehörigen Basisvektoren $|v_i\rangle := i \in \mathbb{N}$ aufgetragen. Unter Berücksichtigung von $\| |\Psi\rangle \|^2 = \sum_i |\Psi_i|^2 = 1$ und $\Delta i = 1$ resultiert daraus

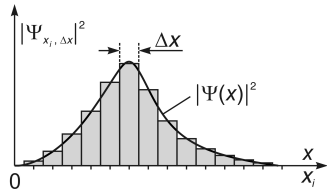
$$\sum_i \frac{|\Psi_i|^2}{\Delta i} \cdot \Delta i = \sum_i \frac{|\Psi_i|^2}{1} \cdot 1 = \sum_i |\Psi_i|^2 = 1.$$

Ein Histogramm ist eine diskrete „Differentialdarstellung“ und repräsentiert die Verteilungsdichte. Es ist also allgemein die Darstellung der Differenzenquotienten $\frac{\Delta N_i}{\Delta x_i}$ über den x_i bzw. die Aufteilung von N_{ges} auf die Δx_i gemäß

$$\sum_i \frac{\Delta N_i}{\Delta x_i} \cdot \Delta x_i = \sum_i \Delta N_i = N_{\text{ges}}.$$

Wenn wir die Betragsquadrate $|\Psi_i|^2$ der Entwicklungskoeffizienten Ψ_i über der zugehörigen diskreten Basis $\{|v_i\rangle\}$ bzw. $\{|i\rangle\}$ z.B. in Form eines Histogramms auftragen, erhalten wir die diskrete Darstellung der Verteilungsdichte der Wahrscheinlichkeiten des Zustands $|\Psi\rangle$ bezüglich der Basis $\{|v_i\rangle\}$ (siehe Abb. 9.1).

Abb. 9.2 Veranschaulichung des Übergangs von der diskreten Darstellung (s. Abb. 9.1) der Verteilungsdichte zur kontinuierlichen Darstellung der Verteilungsdichte gemäß



$$\lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \sum_i \frac{\Delta N_i}{\Delta x_i} \cdot \Delta x_i = \int \frac{dN(x)}{dx} \cdot dx = \int f(x) \cdot dx = N_{\text{ges}}$$

mit der Analogie

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_i \frac{|\Psi_{x_i, \Delta x}|^2}{\Delta x} \cdot \Delta x = \int |\Psi(x)|^2 \cdot dx = 1$$

und dem Differentialquotienten $\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{|\Psi_{x_i, \Delta x}|^2}{\Delta x} = |\Psi(x)|^2$.

Was passiert, wenn wir die Basis $\{|i\rangle\}$ entsprechend $i = 1, 2, 3, \dots$ immer mehr verfeinern (siehe Abb. 9.2) und die Breite der Intervalle $\Delta i = (i+1) - i = 1$ auf der x -Achse schließlich gegen Null gehen lassen?¹ Wegen der Verfeinerung verwenden wir dann statt des (diskreten) Laufindex i die (kontinuierliche) Koordinate x und an Stelle der Basisvektoren $|v_i\rangle$ schreiben wir $|v_{x, \Delta x}\rangle$, sodass zusammenfassend gilt

$$\begin{aligned} i = 1, 2, 3, \dots \text{ mit } \Delta i = 1 &\Rightarrow |v_i\rangle \longrightarrow \\ x \in \mathbb{R} \text{ mit } 0 < \Delta x < 1 &\Rightarrow |v_{x, \Delta x}\rangle. \end{aligned}$$

¹Im Fall diskreter Basisvektoren gilt auch bei einer Verfeinerung stets $\Delta i = (i+1) - i = 1$. Gegen Null gehen können die Intervalle selbstverständlich nur im Fall kontinuierlicher „Basisvektoren“ z.B. auf der x -Achse. Diese kontinuierlichen „Basisvektoren“ zu konstruieren ist aber gerade das Ziel unserer Überlegungen. **Achtung!** Das x in x -Achse steht in diesem Zusammenhang nicht notwendigerweise für die Ortskoordinate.

Für die Entwicklungskoeffizienten bzw. skalaren Vektorkomponenten des Zustandsvektors $|\Psi\rangle$ erhalten wir damit

$$c_i = \Psi_i = \langle v_i | \Psi \rangle \longrightarrow$$

$$c_{x, \Delta x} = \Psi_{x, \Delta x} = \langle v_{x, \Delta x} | \Psi \rangle . \quad (9.1)$$

Analog zu einem Differenzenquotienten $\frac{\Delta y(x)}{\Delta x}$ konstruieren wir uns jetzt den Differenzenquotienten aus der skalaren Vektorkomponente (9.1), nämlich

$$\frac{\langle v_{x, \Delta x} | \Psi \rangle}{\sqrt{\Delta x}} .$$

Hierbei ist der Zähler $\langle v_{x, \Delta x} | \Psi \rangle$ eine bestimmte skalare Vektorkomponente $\Psi_{x, \Delta x}$ von $|\Psi\rangle$ bzw. die „Änderung von $|\Psi\rangle$ pro Basisvektor $|v_{x, \Delta x}\rangle$ “. Der Nenner $\sqrt{\Delta x}$ entspricht dem Intervall Δx , welches ein Basisvektor auf der x -Achse einnimmt. Sinngemäß resultiert also die Änderung von $|\Psi\rangle$ pro Wurzel aus der Änderung von x . Aus Gründen der Normierung verwenden wir hier im Nenner $\sqrt{\Delta x}$ und nicht Δx , was im folgenden Abschnitt 9.2 deutlich werden wird.

Aus diesem Differenzenquotienten bilden wir den Differentialquotienten für Δx gegen Null:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{\langle v_{x, \Delta x} | \Psi \rangle}{\sqrt{\Delta x}} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \left\langle \frac{v_{x, \Delta x}}{\sqrt{\Delta x}} \middle| \Psi \right\rangle = \left\langle \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{v_{x, \Delta x}}{\sqrt{\Delta x}} \middle| \Psi \right\rangle . \quad (9.2)$$

Hierbei konnten wir $|\Psi\rangle$ aus dem Quotienten herausziehen, weil $|\Psi\rangle$ basisfrei und unabhängig von x ist. Der Differentialquotient (9.2) ist eine Verteilungsfunktion, abhängig von x , die wir wie folgt notieren:

$$\Psi(x) = \left\langle \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{v_{x, \Delta x}}{\sqrt{\Delta x}} \middle| \Psi \right\rangle = \langle v_x^D | \Psi \rangle .$$

Der hochgestellte Index D steht hier für die erste Ableitung und

$$|v_x^D\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{|v_{x, \Delta x}\rangle}{\sqrt{\Delta x}} = \frac{|v_{x, dx}\rangle}{\sqrt{dx}} \quad (9.3)$$

ist der formale **Dirac-Vektor**, welcher der **ersten Ableitung** der diskreten Basisvektoren $|v_i\rangle$ nach x entspricht und eine kontinuierliche Basis repräsentiert.

Die (kontinuierliche) Funktion $\Psi(x)$ entspricht der ersten Ableitung der (diskreten) Entwicklungskoeffizienten $\langle v_i | \Psi \rangle$ nach x .

$\Psi(x)$ nennt man die **Wahrscheinlichkeitsamplitude** und $|\Psi(x)|^2$, also das Betragsquadrat der Wahrscheinlichkeitsamplitude, die **Wahrscheinlichkeitsdichte**. Folglich erhält man durch Integration der Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x)|^2$ über den gesamten „ x -Raum“ die Wahrscheinlichkeit

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int \Psi^*(x) \cdot \Psi(x) dx = \int \Psi(x) \cdot \Psi^*(x) dx = 1$$

für eine mögliche Realisierung, z. B. einen Messwert, von $|\Psi\rangle$.

9.2 Entwicklungssatz, Orthonormalität, Vollständigkeit und Skalarprodukt in kontinuierlicher Basis

Der (diskrete) Entwicklungssatz

$$|\Psi\rangle = \sum_i |v_i\rangle \langle v_i | \Psi\rangle$$

erhält mit $\langle v_i | \Psi\rangle \longrightarrow \langle v_{x,\Delta x} | \Psi\rangle$ die Form

$$|\Psi\rangle = \sum_i |v_{x,\Delta x}\rangle \langle v_{x,\Delta x} | \Psi\rangle$$

und für $\Delta x \rightarrow 0$

$$|\Psi\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_i |v_{x,\Delta x}\rangle \langle v_{x,\Delta x} | \Psi\rangle . \quad (9.4)$$

Der formale Dirac-Vektor (9.3) liefert nach Äquivalenzumformung

$$|v_x^D\rangle = \frac{\lim_{\Delta x \rightarrow 0} |v_{x,\Delta x}\rangle}{\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sqrt{\Delta x}} \Leftrightarrow \lim_{\Delta x \rightarrow 0} |v_{x,\Delta x}\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sqrt{\Delta x} \cdot |v_x^D\rangle \implies \quad (9.5)$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} |v_{x,\Delta x}\rangle \langle v_{x,\Delta x}| = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sqrt{\Delta x} \cdot |v_x^D\rangle \langle v_x^D| \cdot \sqrt{\Delta x} ,$$

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} |v_{x,\Delta x}\rangle \langle v_{x,\Delta x}| = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} |v_x^D\rangle \langle v_x^D| \cdot \Delta x . \quad (9.6)$$

Einsetzen von (9.6) in (9.4) ergibt die Riemann-Summe

$$|\Psi\rangle = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \sum_x |v_x^D\rangle \underbrace{\langle v_x^D | \Psi\rangle}_{=\Psi(x)} \cdot \Delta x ,$$

die man als Integral, den **Entwicklungssatz** für den Hilbert-Vektor $|\Psi\rangle$ bezüglich einer kontinuierlichen Basis, schreiben kann:

$$\boxed{|\Psi\rangle = \int |v_x^D\rangle \langle v_x^D | \Psi\rangle \, dx = \int |v_x^D\rangle \Psi(x) \, dx} . \quad (9.7)$$

Die Multiplikation von links mit dem bra-Vektor $\langle v_{x'}^D |$ liefert

$$\langle v_{x'}^D | \Psi\rangle = \int \langle v_{x'}^D | v_x^D\rangle \langle v_x^D | \Psi\rangle \, dx$$

und zeigt für beliebige $|\Psi\rangle$

$$\langle v_{x'}^D | \Psi\rangle = \int \delta(x - x') \langle v_x^D | \Psi\rangle \, dx .$$

Wie wir sehen, sind die formalen Dirac-Vektoren $|v_x^D\rangle$ über die δ -Funktion

$$\langle v_{x'}^D | v_x^D \rangle = \delta(x - x') = \begin{cases} \rightarrow \infty & \text{für } x = x' , \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (9.8)$$

als Orthonormierungsbedingung (**Orthonormalitätsbedingung**) gemäß

$$\int \langle v_{x'}^D | v_x^D \rangle dx = \int \delta(x - x') dx = \begin{cases} 1 & \text{wenn } x' \text{ im Integrationsbereich liegt,} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

auf 1 normiert. Die formalen Dirac-Vektoren leisten also nur an der Stelle $x = x'$ unter dem Integral den Beitrag 1, sonst, für $x \neq x'$, aber den Beitrag 0. Das bedeutet, dass die formalen Dirac-Vektoren nur unter dem Integral das Analogon zu den Hilbert-Basis-Vektoren darstellen. Dies erkennt man auch daran, dass die formalen Dirac-Vektoren selbst gemäß der Orthonormalitätsbedingung (9.8) an der Stelle $x = x'$ die Norm $\sqrt{\langle v_{x'}^D | v_{x'}^D \rangle} \rightarrow \infty$, also eine unendliche „Länge“ besitzen.

Die Herleitung der Vollständigkeitsrelation für eine kontinuierliche Basis beginnen wir mit dem Skalarprodukt eines orthonormierten Hilbert-Vektors $|\Psi\rangle$ mit sich selbst in der (diskreten) VON-Basis $\{|v_i\rangle\}$:

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_i \langle \Psi | v_i \rangle \langle v_i | \Psi \rangle = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_i |v_i\rangle \langle v_i| = \mathbb{1} \quad (9.9)$$

Diese Darstellung bzw. dieses Ergebnis ist nur dann möglich, wenn die Basis $\{|v_i\rangle\}$ den zu $|\Psi\rangle$ gehörenden Hilbert-Raum $\mathcal{H}$ *vollständig* aufspannt. Deshalb ist (9.9) die Vollständigkeitsrelation bezüglich der diskreten VON-Basis $\{|v_i\rangle\}$.

Im Fall einer kontinuierlichen Basis gehen wir aus vom Entwicklungssatz (9.7) :

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int |v_x^D\rangle \langle v_x^D | \Psi \rangle dx \\ &= \underbrace{\int dx |v_x^D\rangle \langle v_x^D |}_{=\mathbb{1}} |\Psi\rangle \end{aligned} \quad (9.10)$$

Aus (9.10) folgt die **Vollständigkeitsrelation** für eine kontinuierliche Basis mit der Einheitsmatrix bzw. dem Identitätsoperator $\mathbb{1}$:

$$\boxed{\int |v_x^D\rangle \langle v_x^D | dx = \mathbb{1}} \quad (9.11)$$

Aus den beiden basisfreien Zustandsvektoren $|\Phi\rangle$ und $|\Psi\rangle$ erhalten wir in der diskreten VON-Basis $\{|v_i\rangle\}$ das Skalarprodukt

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \sum_i \underbrace{\langle \Phi | v_i \rangle}_{k_i^*} \underbrace{\langle v_i | \Psi \rangle}_{c_i} = \sum_i k_i^* c_i$$

und analog dazu in der kontinuierliche Basis $\{|v_x^D\rangle\}$ unter Verwendung der entsprechenden Vollständigkeitsrelation das äquivalente Skalarprodukt

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \int \langle\Phi|v_x^D\rangle\langle v_x^D|\Psi\rangle dx = \int \Phi^*(x)\Psi(x) dx .$$

9.3 Darstellung des formalen Dirac-Vektors in kontinuierlicher Basis und sein Eigendifferential

Um Näheres über die Eigenschaften des formalen Dirac-Vektors zu erfahren, entwickeln zunächst den ket-Vektor $|v_{x,\Delta x}\rangle$ in der kontinuierlichen Basis gemäß (9.7). Dabei ist die Änderung der Strichindizierung von x zu beachten. Diese erfolgt zur besseren Unterscheidung der Integrationsvariablen in dem sich später ergebenden Doppelintegral:

$$|v_{x,\Delta x}\rangle = \int dx' |v_{x'}^D\rangle\langle v_{x'}^D|v_{x,\Delta x}\rangle = \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} dx' |v_{x'}^D\rangle \underbrace{\langle v_{x'}^D|v_{x,\Delta x}\rangle}_{\delta_{x'x}} . \quad (9.12)$$

Für das in (9.12) unterklammerte Skalarprodukt resultiert unter Berücksichtigung von (9.5)

$$\begin{aligned} \langle v_{x'}^D|v_{x,\Delta x}\rangle &= \lim_{\Delta x' \rightarrow 0} \left\langle \frac{v_{x',\Delta x'}}{\sqrt{\Delta x'}} \middle| v_{x,\Delta x} \right\rangle \\ &= \lim_{\Delta x' \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta x'}} \underbrace{\langle v_{x',\Delta x'}|v_{x,\Delta x}\rangle}_{\delta_{x'x}} \\ \langle v_{x'}^D|v_{x,\Delta x}\rangle &= \lim_{\Delta x' \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\Delta x'}} \delta_{x'x} . \end{aligned} \quad (9.13)$$

Die damit verdeutlichte Orthogonalität in (9.13) rechtfertigt die Festlegung der Integrationsgrenzen in (9.12). Für *hinreichend kleine*² $\Delta x'$ bzw. Δx und für $x' = x \Rightarrow \delta_{x'x} = 1$ wird das unterklammerte Skalarprodukt zu

$$\langle v_{x'}^D|v_{x,\Delta x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Delta x}}$$

und lässt sich vor das Integral (9.12) ziehen:

$$|v_{x,\Delta x}\rangle \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} dx' |v_{x'}^D\rangle = |\text{ED}(x)\rangle .$$

(9.14)

(9.14) heißt **Eigendifferential** des formalen Dirac-Vektors $|v_x^D\rangle$.

²Vereinfachend verzichten wir darauf, in den Integrationsgrenzen und im Radikanden für die hinreichend kleinen Δx bzw. $\Delta x'$ die Differentialnotation dx bzw. dx' zu verwenden. Man kommt auch ohne diese Umbenennung zum richtigen Ergebnis.

Die (kontinuierlichen) formalen Dirac-Vektoren mit ihrer unendlichen Länge sind keine Elemente des Hilbert-Raums. Ihre Eigendifferentiale erfüllen jedoch die Hilbert-Raum-Axiome. Z. B. sind sie normiert:

$$\begin{aligned}
\langle \text{ED}(x) | \text{ED}(x) \rangle &= \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} dx'' \langle v_{x''}^D | \cdot \frac{1}{\sqrt{\Delta x}} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} dx' | v_{x'}^D \rangle \\
&= \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} \int dx' dx'' \underbrace{\langle v_{x''}^D | v_{x'}^D \rangle}_{(9.8)} \\
&= \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} \int dx' dx'' \delta(x'' - x') \\
&= \frac{1}{\Delta x} \int_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} dx' \\
&= \frac{1}{\Delta x} \cdot x \Big|_{x-\frac{1}{2}\Delta x}^{x+\frac{1}{2}\Delta x} = \frac{(x + \frac{1}{2}\Delta x) - (x - \frac{1}{2}\Delta x)}{\Delta x} = \frac{\Delta x}{\Delta x} \\
\langle \text{ED}(x) | \text{ED}(x) \rangle &= 1 . \quad \square
\end{aligned}$$

9.4 Orts- und Impulsdarstellung von Zustandsvektoren und Operatoren

Nach: Torsten Fließbach, *Quantenmechanik, Lehrbuch zur Theoretischen Physik III*, 4. Auflage, Elsevier Spektrum Akademischer Verlag, München, 2005, Seite 233 und Seite 234.

Analog zur Vektorrechnung im $\mathbb{R}^3$ ist der Kalkül der basisfreien Zustandsvektoren und Operatoren in $\mathcal{H}$ bzw. der Dirac-Formalismus „leider“ abstrakt. Um physikalische Probleme bzw. physikalische Größen berechnen zu können, ist deshalb die algebraische Darstellung der Zustandsvektoren und Operatoren in einer zur Berechnung geeigneten Basis erforderlich. So müssen die basisfreien Zustandsvektoren in Funktionen überführt werden, die die Abhängigkeit z. B. von Energie, Impuls oder Ort zum Ausdruck bringen und zusammen mit den in der gleichen Basis dargestellten Operatoren die Berechnung dieser physikalischen Größen ermöglichen.³ Hierbei kommen uns die

³Vielleicht stellt sich an dieser Stelle die Frage, wozu man den abstrakten Dirac-Formalismus überhaupt braucht, wenn man am Ende die Berechnungen quantenmechanischer Probleme trotzdem in irgendeiner Darstellung durchführen muss. Tatsächlich sind viele Herleitungen und Zusammenhänge in abstrakter Form viel bequemer und übersichtlicher darstellbar. Ein einfaches, bekanntes Beispiel dafür ist die Beschreibung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators u. a. mit Hilfe des Erzeugungsoperators $\hat{a}^\dagger$ und des Vernichtungsoperators $\hat{a}$.

aus dem **Korrespondenzprinzip** hervorgehenden **Ersetzungsregeln** (Korrespondenzregeln) zu Hilfe. Das Korrespondenzprinzip stellt u. a. auch den Zusammenhang her zwischen dem abstrakten Dirac-Formalismus und der Wellenmechanik von Erwin Schrödinger (1887 – 1961), insbesondere der von ihm postulierten und nach ihm benannten Schrödinger-Gleichung.

Anstelle der bisher allgemein im Dirac-Formalismus verwendeten (uneigentlichen) formalen Dirac-Vektoren $|\psi_x^D\rangle$ verwenden wir jetzt, je nach Darstellung, die uneigentlichen Orts- oder Impulseigenzustände.

Die uneigentlichen Ortseigenzustände $|x\rangle$ (1-dimensional) bzw. $|\vec{r}\rangle$ (3-dimensional) bilden die kontinuierlichen Basen $\{|x\rangle\}$ bzw. $\{|\vec{r}\rangle\}$.

Die uneigentlichen Impulseigenzustände $|p\rangle$ (1-dimensional) bzw. $|\vec{p}\rangle$ (3-dimensional) bilden die kontinuierlichen Basen $\{|p\rangle\}$ bzw. $\{|\vec{p}\rangle\}$.

In Analogie zu 9.8 gilt für die Orts- und Impulseigenzustände

$$\begin{aligned} \langle x|x'\rangle &= \delta(x-x') & \text{bzw.} & & \langle \vec{r}|\vec{r}'\rangle &= \delta(\vec{r}-\vec{r}') , \\ \langle p|p'\rangle &= \delta(p-p') & \text{bzw.} & & \langle \vec{p}|\vec{p}'\rangle &= \delta(\vec{p}-\vec{p}') . \end{aligned}$$

Daraus ergeben sich die folgenden Dimensionen für die Ortseigenzustände:

$$|x\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{\text{Länge}}} \quad \text{bzw.} \quad |\vec{r}\rangle \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{\text{Länge}^3}} .$$

Die Eigenwertgleichungen für den Orts- und für den Impulsoperator sind damit

$$\begin{aligned} \hat{x}|x\rangle &= x|x\rangle & \text{bzw.} & & \hat{\vec{r}}|\vec{r}\rangle &= \vec{r}|\vec{r}\rangle , \\ \hat{p}|p\rangle &= p|p\rangle & \text{bzw.} & & \hat{\vec{p}}|\vec{p}\rangle &= \vec{p}|\vec{p}\rangle \end{aligned}$$

und die Wahrscheinlichkeitsamplituden für einen basisfreien Zustand $|\Psi\rangle$ in Orts- und in Impulsdarstellung sind

$$\begin{aligned} \langle x|\Psi\rangle &= \Psi(x) & \text{bzw.} & & \langle \vec{r}|\Psi\rangle &= \Psi(\vec{r}) , \\ \langle p|\Psi\rangle &= \Psi(p) & \text{bzw.} & & \langle \vec{p}|\Psi\rangle &= \Psi(\vec{p}) . \end{aligned}$$

Den Übergang zwischen einem basisfreien Operator $\hat{O}$ und seiner Darstellung $O(x)$ wollen wir uns jetzt anschauen. Dabei gehen wir rekursiv vor und beginnen mit der Operatorgleichung, dargestellt in Abhängigkeit von der Größe x . Wenn x z. B. der Ort ist, dann wirkt der Operator $\hat{O}$ in Form seiner Ortsdarstellung $O(x)$ auf eine Funktion $\Psi(x)$ und erzeugt dabei eine andere Funktion $\Phi(x)$:

$$\Phi(x) = O(x) \Psi(x) . \tag{9.15}$$

Es handelt sich hier natürlich **nicht** um den speziellen Fall einer Eigenwertgleichung. Dieser Gleichung entspricht im Dirac-Formalismus die abstrakte, basisfreie Gleichung

$$|\Phi\rangle = \hat{O} |\Psi\rangle . \tag{9.16}$$

(9.15) ist also die Ortsdarstellung von (9.16).

Mit dem Identitätsoperator (9.10) schreiben wir für (9.16)

$$|\Phi\rangle = \hat{O} \mathbb{1} |\Psi\rangle = \hat{O} \int dx' |x'\rangle \langle x'| |\Psi\rangle = \int dx' \hat{O} |x'\rangle \langle x'| \Psi\rangle . \quad (9.17)$$

Die Multiplikation von links mit dem bra-Vektor $\langle x|$, d. h. die Projektion von (9.17) auf $|x\rangle$ liefert

$$\begin{aligned} \langle x|\Phi\rangle = \Phi(x) &= \int dx' \langle x|\hat{O}|x'\rangle \langle x'|\Psi\rangle \\ &= \int dx' \underbrace{\langle x|\hat{O}|x'\rangle}_{\delta(x-x') O(x')} \Psi(x') \\ &= \int dx' \overbrace{\delta(x-x') O(x')} \Psi(x') \\ \Phi(x) &= O(x) \Psi(x) . \end{aligned}$$

Wie wir sehen, kommt der Zusammenhang zwischen dem Operator $\hat{O}$ und seiner Ortsdarstellung $O(x)$ in der Gleichung

$$\langle x|\hat{O}|x'\rangle = \delta(x-x') O(x')$$

zum Ausdruck, wobei $\langle x|\hat{O}|x'\rangle$ das Matrixelement von $\hat{O}$ bezüglich der kontinuierlichen Basis $\{|x\rangle\}$ ist. Zur Verdeutlichung geben wir noch einige Operator-Ortsdarstellungen in dieser Form an:

$$\text{Hamilton-Operator:} \quad \langle x|\hat{H}|x'\rangle = \delta(x-x') \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + V(x', t) \right) ,$$

$$\text{Ortsoperator:} \quad \langle x|\hat{x}|x'\rangle = \delta(x-x') x' = \delta(x-x') x ,$$

$$\text{Impulsoperator:} \quad \langle x|\hat{p}|x'\rangle = \delta(x-x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) .$$

Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t) \quad (9.18)$$

ist im weitesten Sinne grundlegend für die Energie-Verhältnisse in quantenmechanischen Teilchensystemen. Mit dem Hamilton-Operator in Ortsdarstellung

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V = H_{\text{klassisch}}$$

erhält sie die Form

$$H \Psi(\vec{r}, t) = E \Psi(\vec{r}, t) ,$$

woran wir die Ersetzungsregeln für die Energie E und den Impuls $\vec{p}$ ablesen können. In der folgenden Tabelle sind die wichtigsten Ersetzungsregeln dargestellt:

basisfrei			Ortsdarstellung	Impulsdarstellung
$\hat{H}$	Hamilton-Operator	$\rightarrow$	$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\vec{r}}^2 + V(\vec{r}, t)$	
E	Energie	$\rightarrow$	$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$	
$\hat{p}$	Impulsoperator	$\rightarrow$	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	p
$\hat{\vec{p}}$	Impulsoperator	$\rightarrow$	$-i\hbar \nabla_{\vec{r}}$	$\vec{p}$
$\hat{x}$	Ortsoperator	$\rightarrow$	x	$i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$
$\hat{\vec{r}}$	Ortsoperator	$\rightarrow$	$\vec{r}$	$i\hbar \nabla_{\vec{p}}$
$\mathbb{1}$	Identitätsoperator	$=$	$\int d^3r \vec{r}\rangle \langle \vec{r} $	$\int d^3p \vec{p}\rangle \langle \vec{p} $
$\hat{O}$	Operator	$\rightarrow$	$\langle x \hat{O} x'\rangle = \delta(x - x') O(x')$	

Es fällt bei den Ersetzungsregeln auf, dass die Wirkung des Ortsoperators in Ortsdarstellung einfach nur in der Multiplikation mit x bzw. $\vec{r}$ und die Wirkung des Impulsoperators in Impulsdarstellung einfach nur in der Multiplikation mit p bzw. $\vec{p}$ besteht.

In den folgenden Abschnitten zeigen wir noch die Überführung der basisfreien Impuls- und Ortseigenzustände in ihre Orts- und ihre Impulsdarstellung.

9.4.1 Ortsdarstellung der Impulseigenzustände

Wir beginnen mit der Ortsdarstellung der Impulseigenzustände $|p\rangle$ und gehen aus von der entsprechenden Impuls-Eigenwertgleichung:

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle .$$

Durch Multiplikation mit dem uneigentlichen bra-Vektor $\langle x|$ aus der Basis, die der kontinuierlichen Ortsbasis $\{|x\rangle\}$ entspricht, erhalten wir die abstrakte Ortsdarstellung der Impuls-Eigenwertgleichung:

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p \langle x|p\rangle . \quad (9.19)$$

In ihr erkennen wir die Ortsdarstellung $\langle x|p\rangle = \Psi_p(x)$ der Impulseigenzustände $|p\rangle$. Zur Berechnung der Funktion $\Psi_p(x)$ verwenden wir jetzt die Ersetzungsregel $-i\hbar d/dx$ für den Impulsoperator $\hat{p}$ und überführen damit (9.19) in die algebraische Form der Eigenwertgleichung:

$$-i\hbar \frac{d}{dx} \Psi_p(x) = p \Psi_p(x) .$$

Als allgemeine Lösung für diese Differentialgleichung finden wir mit dem Exponentialansatz $\Psi_p(x) = e^{\alpha \cdot x}$ und daraus resultierend mit $\alpha = \frac{i}{\hbar} p$

$$\Psi_p(x) = C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}.$$

Wie wir sehen, ist der Impulseigenzustand $|p\rangle$ in Ortsdarstellung die ortsabhängige Impulseigenfunktion $C \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}$. Bei ihr handelt es sich um eine Wellenfunktion im Ortsraum, die einer *ebenen Welle* entspricht. Ebene Wellen sind aber nicht quadratintegrabel und folglich nicht normierbar, sodass unter Berücksichtigung der Fourier-Transformation (10.1) die folgende Orthonormalitätsbedingung resultiert:

$$\begin{aligned} \langle p|p' \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p' x}, \\ \langle p|p' \rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} (p-p')x} = \delta(p-p'). \end{aligned} \quad (9.20)$$

Die Fourier-Transformierte einer ebenen Welle ist nämlich die δ -Funktion. Wie man sieht, ergibt sich aus dieser Darstellung der Normierungsfaktor $C = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$, sodass

$$\langle x|p \rangle = \Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x}.$$

(9.21)

Das Integral über die Orthonormalitätsbedingung (9.20), d. h. über die δ -Funktion, liefert die Orthonormalität der auch bezüglich p kontinuierlichen Impulseigenfunktion $\Psi_p(x)$:

$$\begin{aligned} \int dp \langle p|p' \rangle &= \int dp \int dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) \\ &= \int dp \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p' x} \\ &= \int dp \delta(p-p') = \begin{cases} 1 & \text{wenn } p' \text{ im Integrationsbereich,} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \end{aligned}$$

mit dem Skalarprodukt in Ortsdarstellung

$$\langle p|p' \rangle = \int dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) = \int dx \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar} (p-p')x} = \delta(p-p'),$$

das auch gleichzeitig die **Impulsdarstellung der Eigenfunktionen zum Impulsoperator** ist. Das Integral über die δ -Funktion liefert *nur* an der Stelle $p = p'$ einen Beitrag mit dem Wert 1.

Im speziellen Fall, z. B. für die Bewegung eines Teilchens im eindimensionalen, unendlich hohen Potentialtopf der Breite L und symmetrisch zu $x = 0$, ist aber unter Verwendung der sich dann daraus ergebenden *periodischen Randbedingungen* die Normierung möglich:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \Psi_p^*(x) \Psi_p(x) &= \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx C^* e^{-\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \cdot C e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} \\
 &= \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx |C|^2 = |C|^2 \cdot x \Big|_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} = |C|^2 \cdot L \stackrel{!}{=} 1 \\
 \Leftrightarrow C &= \frac{1}{\sqrt{L}} .
 \end{aligned}$$

Die normierten Impulseigenfunktionen in Ortsdarstellung für ein Teilchen im eindimensionalen, unendlich hohen Potentialtopf sind schließlich

$$\Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i}{\hbar} p \cdot x} ,$$

$$p = \frac{2\pi\hbar}{L} n , \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots ,$$

wie man sich unter Berücksichtigung der periodischen Randbedingungen und der Heisenberg'schen Unschärferelation überlegen kann. Diese Impulseigenfunktionen sind ordentliche, orthonormierte Eigenvektoren gemäß

$$p - p' = m \cdot \frac{2\pi\hbar}{L} , \quad m \in \mathbb{Z} ,$$

$$\begin{aligned}
 p \neq p' : \quad \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) &= \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \\
 &= \frac{1}{L} \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(p-p')} \left[e^{\frac{i}{\hbar}(p-p')\frac{L}{2}} - e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')\frac{L}{2}} \right] \\
 &= \frac{\hbar}{L i(p-p')} 2i \sin \left[\frac{1}{\hbar} (p-p') \frac{L}{2} \right] \\
 &= \frac{1}{m \cdot \pi} \sin(m \cdot \pi) = 0 ,
 \end{aligned}$$

sodass

$$\langle p | p' \rangle = \frac{1}{L} \int_{-\frac{L}{2}}^{+\frac{L}{2}} dx e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \begin{cases} 1 & \text{für } p = p' \\ 0 & \text{für } p \neq p' \end{cases} = \delta_{p'p} .$$

Wir stellen fest:

Die Impulseigenfunktionen $\Psi_p(x)$ sind bezüglich x , d.h. bezüglich des Ortsraums, kontinuierliche Funktionen.

Im Fall des unbegrenzten (unbeschränkten) Ortsraums sind die Impulseigenfunktionen $\Psi_p(x)$ auch bezüglich des Impulses p kontinuierlich. Es handelt sich dann um Kontinuums-eigenfunktionen mit einem kontinuierlichen Eigenwertspektrum. Bezüglich p kontinuierliche Impulseigenfunktionen sind dann über die δ -Funktion $\delta(p - p')$ orthonormiert.

Im Fall des begrenzten Ortsraums dagegen sind die Impulseigenfunktionen $\Psi_p(x)$ bezüglich des Impulses p diskret (diskontinuierliches) verteilt, besitzen ein diskretes Eigenwertspektrum und sind gemäß dem Kronecker- $\delta_{p'p}$ orthonormiert.

9.4.2 Impulsdarstellung der Ortseigenzustände

Die Impulsdarstellung der Ortseigenzustände erhält man analog zur Ortsdarstellung der Impulseigenzustände. Deshalb wird die entsprechende Herleitung nur skizziert:

$$\begin{aligned}\hat{x}|x\rangle &= x|x\rangle, \\ \langle p|\hat{x}|x\rangle &= x\langle p|x\rangle, \\ i\hbar \frac{d}{dp} \Psi_x(p) &= x \Psi_x(p),\end{aligned}$$

$$\langle p|x\rangle = \Psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}x \cdot p}.$$

(9.22)

Hinsichtlich der Orthonormalität der Ortseigenfunktionen gilt analog zu den Impulseigenfunktionen

$$\begin{aligned}\int dx \langle x|x'\rangle &= \int dx \delta(x - x') \quad \text{falls Impulsraum unbeschränkt,} \\ \langle x|x'\rangle &= \delta_{x'x} \quad \text{falls Impulsraum beschränkt}\end{aligned}$$

mit dem Skalarprodukt in Impulsdarstellung

$$\langle x|x'\rangle = \int dp \Psi_x^*(p) \Psi_{x'}(p) = \int dp \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}(x-x')p} = \delta(x - x'),$$

das auch gleichzeitig die **Ortsdarstellung der Eigenfunktionen zum Ortsoperator** ist.

10 Fourier-Transformation der Impuls- und Ortseigenfunktionen

Wir zeigen jetzt die Überführung der Impulseigenfunktionen in Ortsdarstellung in die Ortseigenfunktionen in Impulsdarstellung und umgekehrt mit Hilfe der entsprechenden Fourier-Transformation. Allgemein, also 3-dimensional und ohne Berücksichtigung physikalischer Inhalte, verwenden wir die übliche Form der Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} f(\vec{r}) &\xrightarrow{\mathcal{F}} \tilde{f}(\vec{k}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r f(\vec{r}) e^{-i\vec{k}\vec{r}}, \\ \tilde{f}(\vec{k}) &\xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} f(\vec{r}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d^3k \tilde{f}(\vec{k}) e^{i\vec{k}\vec{r}}. \end{aligned}$$

Hier ist $\mathcal{F}$ die Fourier-Transformation und $\mathcal{F}^{-1}$ die Umkehroperation, die inverse Fourier-Transformation. Wenn die Funktion $f(\vec{r})$ die Originalfunktion ist, dann heißt $\tilde{f}(\vec{k})$ Fourier-Transformierte von $f(\vec{r})$ und $f(\vec{r})$ heißt inverse Fourier-Transformierte von $\tilde{f}(\vec{k})$. Das Vorzeichen im Exponenten der e -Funktion und die Aufteilung des Normierungsfaktors $1/(2\pi)^{3/2}$ auf die Funktionen f und $\tilde{f}$ sind Konvention.

Angewandt auf die Ortsdarstellung der Impulseigenfunktion $\Psi_p(x)$ als Originalfunktion bedeutet das die Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} \Psi_p(x) &\xrightarrow{\mathcal{F}} \tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi_p(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px}, \\ \tilde{\Psi}(p) &\xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \Psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\Psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} \end{aligned}$$

und angewandt auf die Impulsdarstellung der Ortseigenfunktion $\Psi_x(p)$ als Originalfunktion analog

$$\begin{aligned} \Psi_x(p) &\xrightarrow{\mathcal{F}} \tilde{\Psi}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \Psi_x(p) e^{\frac{i}{\hbar}px}, \\ \tilde{\Psi}(x) &\xrightarrow{\mathcal{F}^{-1}} \Psi_x(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \tilde{\Psi}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px}. \end{aligned}$$

Es zeigt sich, dass bei breiter Verteilung einer Funktion die zugehörige Fourier-Transformierte eine schmale Verteilung besitzt und umgekehrt. Wir hatten bereits festgestellt, dass die Impulseigenfunktionen (9.21) und die Ortseigenfunktionen (9.22) (unendlich breit verteilten) ebenen Wellen entsprechen. Demzufolge müssen ihre Fourier-Transformierten jeweils δ -Funktionen sein.

$\Psi_{p'}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x}$ sei die Originalfunktion, entsprechend einer ebenen Welle :

$$\begin{aligned}
\stackrel{\mathcal{F}}{\longrightarrow} \quad \tilde{\Psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \Psi_{p'}(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x} \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} \quad (10.1)
\end{aligned}$$

$$\tilde{\Psi}(p) = \delta(p - p') = \langle p|p' \rangle ,$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(p) = \delta(p - p') \quad \stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\longrightarrow} \quad \Psi'_p(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \tilde{\Psi}(p) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \delta(p - p') \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x} = \Psi_{p'}(x) . \quad \square
\end{aligned}$$

$\Psi_{x'}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px'}$ sei die Originalfunktion, entsprechend einer ebenen Welle :

$$\begin{aligned}
\stackrel{\mathcal{F}}{\longrightarrow} \quad \tilde{\Psi}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \Psi_{x'}(p) \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px'} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')}
\end{aligned}$$

$$\tilde{\Psi}(x) = \delta(x - x') = \langle x|x' \rangle ,$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\Psi}(x) = \delta(x - x') \quad \stackrel{\mathcal{F}^{-1}}{\longrightarrow} \quad \Psi_{x'}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \tilde{\Psi}(x) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx \delta(x - x') \cdot e^{-\frac{i}{\hbar}px} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px'} = \Psi_{x'}(p) . \quad \square
\end{aligned}$$

Im speziellen Fall der Impulseigenfunktionen in Ortsdarstellung ist das Skalarprodukt $\langle p|p' \rangle$ gleich der Fourier-Transformierten von $\Psi_{p'}(x)$, also gleich $\mathcal{F}\{\Psi_{p'}(x)\}$:

$$\begin{aligned}\langle p|p' \rangle &= \int dx \Psi_p^*(x) \Psi_{p'}(x) = \int dx \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} = \\ &= \delta(p-p') = \mathcal{F}\{\Psi_{p'}(x)\} = \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}}_{=\Psi_{p'}(x)} \int dx \underbrace{\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p'x}}_{=\Psi_p^*(x)} \cdot \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}p x}}_{=1},\end{aligned}$$

weil

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}p x} = \Psi_p^*(x).$$

Analog gilt für die Ortseigenfunktionen in Impulsdarstellung

$$\langle x|x' \rangle = \delta(x-x') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{i}{\hbar}p(x-x')} = \mathcal{F}\{\Psi_{x'}(p)\}.$$

3-dimensional und vereinfachend schreibt man oft $|\vec{p}\rangle$ für die basisfreien Impulseigenzustände und $|\vec{r}\rangle$ für die basisfreien Ortseigenzustände. Damit erhalten die Fourier-Transformationen der entsprechenden δ -Funktion die Form:

$$\begin{aligned}\langle \vec{p}|\vec{p}' \rangle &= \delta(\vec{p}-\vec{p}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}-\vec{p}')\vec{r}} , \\ \langle \vec{r}|\vec{r}' \rangle &= \delta(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}(\vec{r}-\vec{r}')} .\end{aligned}$$

Eindimensional und für $p = \hbar k$ und $dp = \hbar dk$ gilt einfach

$$\begin{aligned}\langle k|k' \rangle &= \delta(k-k') = \frac{1}{2\pi} \int dx e^{-i(k-k')x} , \\ \langle x|x' \rangle &= \delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int dk e^{ik(x-x')} .\end{aligned}\tag{10.2}$$

Veranschaulicht kann man sich z. B. (10.2) folgendermaßen vorstellen:

$$\begin{aligned}\text{an der Stelle } x = x' &\Rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^0 = \frac{1}{2\pi} k \Big|_{-\infty}^{+\infty} \rightarrow \infty , \\ \text{für } x \neq x' &\Rightarrow \text{mit } x - x' = \Delta x \\ &\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \left[\cos(k \cdot \Delta x) + i \sin(k \cdot \Delta x) \right] \xrightarrow{\Delta x \neq 0} 0 ,\end{aligned}$$

denn wenn das Integral über den ganzen k -Raum von $-\infty$ bis $+\infty$ läuft, heben sich alle Beiträge der Sinus- und Kosinusfunktion auf.

11 Zusammenfassung Dirac-Formalismus

1. Wie wir feststellen konnten, sind die formalen Dirac-Vektoren keine Elemente des Hilbert-Raums $\mathcal{H}$. Sie werden deshalb auch **uneigentliche Zustandsvektoren** genannt. Ihre Konstruktion in der Dirac-Notation erlaubt aber ihre widerspruchsfreie Eingliederung in den Hilbert-Raum, den man dann als **erweiterten Hilbert-Raum** bezeichnet.

Gelegentlich bezeichnet man den Hilbert-Raum, in dem die abstrakten, basisfreien Zustandsvektoren „leben“, auch als den **Zustandsraum**. Den Raum mit einer diskreten oder kontinuierlichen VON-Basis, in der die Zustandsvektoren dargestellt werden, nennt man **Darstellungsraum**. Die beiden wichtigsten Darstellungsräume sind der (kontinuierliche) Ortsraum und der (kontinuierliche) Impulsraum, oder genauer gesagt, der Raum, der von den Ortseigenfunktionen oder von den Impulseigenfunktionen aufgespannt wird.

Ist das betrachtete quantenmechanische System im Ortsraum oder Impulsraum beschränkt, sind die in ihnen dargestellten Größen diskontinuierlich (diskret) verteilt. Ist das betrachtete quantenmechanische System im Ortsraum oder Impulsraum nicht beschränkt, bilden die in ihnen dargestellten Größen ein Kontinuum.

2. **Formale Dirac-Vektoren** $|v_x^D\rangle$ entsprechen Differentialquotienten (1. Ableitungen) von Basisvektoren mit den zugehörigen Basisvariablenabschnitten:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{|v_{x, \Delta x}\rangle}{\sqrt{\Delta x}} = \frac{|v_{x, dx}\rangle}{\sqrt{dx}} = |v_x^D\rangle .$$

Dirac-Vektoren sind also sinngemäß kontinuierliche Verteilungsfunktionen.

3. Die formalen Dirac-Vektoren $|v_x^D\rangle$ bilden eine **kontinuierliche Basis** $\{|v_x^D\rangle\}$, sind deshalb nicht abzählbar und liegen folglich unendlich dicht beieinander.
4. Formal besitzen Dirac-Vektoren eine **unendlich große Norm** (Länge):

$$\langle v_x^D | v_x^D \rangle \rightarrow \infty .$$

5. **Entwicklungssatz** für einen Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ in der **diskreten** VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \Psi \rangle$$

mit den **Entwicklungskoeffizienten**

$$\langle a_i | \Psi \rangle = c_i .$$

6. **Entwicklungssatz** für einen Zustandsvektor $|\Psi\rangle$ in der **kontinuierlichen** Basis $\{|v_x^D\rangle\}$:

$$|\Psi\rangle = \int |v_x^D\rangle \langle v_x^D | \Psi \rangle dx = \int |v_x^D\rangle \Psi(x) dx$$

mit der **Wahrscheinlichkeitsamplitude** (Funktion)

$$\langle v_x^D | \Psi \rangle = \Psi(x) .$$

7. **Orthonormalität** der (**diskreten**) Basisvektoren $|a_i\rangle$ des Hilbert-Raums $\mathcal{H}$:

$$\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{ij} .$$

8. **Orthonormalitätsbedingung** für (**kontinuierliche**) Dirac-Vektoren $|v_x^D\rangle$:

$$\langle v_x^D | v_{x'}^D \rangle = \delta(x - x') .$$

Dirac-Vektoren sind also auf δ -Funktionen normiert gemäß

$$\int \langle v'_x | v'_{x'} \rangle dx = \int \delta(x - x') dx = \begin{cases} 1 : & x' \text{ im Integrationsbereich,} \\ 0 : & \text{sonst .} \end{cases}$$

9. **Vollständigkeit** einer (**diskreten**) VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$ im Hilbert-Raum $\mathcal{H}$:

$$\sum_i |a_i\rangle \langle a_i| = \mathbb{1} .$$

10. **Vollständigkeitsrelation** für eine (**kontinuierliche**) Basis $\{|v_x^D\rangle\}$ aus den Dirac-Vektoren $|v_x^D\rangle$:

$$\int |v_x^D\rangle \langle v_x^D| dx = \mathbb{1} .$$

$\mathbb{1}$ ist auch hier die Einheitsmatrix bzw. der Identitätsoperator.

11. **Skalarprodukt** aus den basisfreien Zustandsvektoren $|\Phi\rangle$ und $|\Psi\rangle$ in der (kontinuierlichen) Basis $\{|v_x^D\rangle\}$ unter Verwendung der entsprechenden Vollständigkeitsrelation:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int \langle \Phi | v_x^D \rangle \langle v_x^D | \Psi \rangle dx = \int \Phi^*(x) \Psi(x) dx .$$

12. **Operator** $\hat{A}$ dargestellt in VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$:

Hierbei ist $\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle = A_{ij}$ ein Matricelement.

$$\begin{aligned} \hat{A} = \mathbb{1} \hat{A} \mathbb{1} &= \sum_{i,j} |a_i\rangle \underbrace{\langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle}_{A_{ij}} \langle a_j| \\ \hat{A} &= \sum_{i,j} A_{ij} |a_i\rangle \langle a_j| \end{aligned}$$

Matricelement des Operators $\hat{A}$ in Ortsdarstellung:

$$\langle x | \hat{A} | x' \rangle = \delta(x - x') A(x') .$$

13. Erwartungswert:

Der quantenmechanische Mittelwert heißt Erwartungswert. Der Erwartungswert $\langle \hat{A} \rangle$ der Observablen bzw. des Operators $\hat{A}$ bezüglich eines Zustands $|\Psi\rangle$ in der Entwicklung nach der VON-Eigenbasis $\{|a_i\rangle\}$ zu $\hat{A}$ und mit dem diskreten Eigenwertspektrum $\{\lambda_i\}$ ist

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_i \langle \Psi | \underbrace{\hat{A} | a_i \rangle}_{\lambda_i | a_i \rangle} \underbrace{\langle a_i | \Psi \rangle}_{c_i} \\ &= \sum_i \lambda_i \underbrace{\langle \Psi | a_i \rangle}_{c_i^*} c_i = \sum_i \lambda_i \cdot c_i^* c_i \\ \langle \hat{A} \rangle &= \sum_i |c_i|^2 \cdot \lambda_i = \sum_i p_i \cdot \lambda_i .\end{aligned}$$

Die $|c_i|^2 = p_i$ sind die Wahrscheinlichkeiten mit der die zugehörigen Eigenwerte λ_i auftreten.

Den Erwartungswert in Ortsdarstellung erhält man durch geeignetes Einschreiben von Identitätsoperatoren:

$$\begin{aligned}\langle \hat{A} \rangle &= \langle \Psi | \mathbb{1} | \hat{A} | \mathbb{1} | \Psi \rangle \\ &= \int dx \int dx' \underbrace{\langle \Psi | x \rangle}_{\Psi^*(x)} \underbrace{\langle x | \hat{A} | x' \rangle}_{\delta(x-x') A(x')} \underbrace{\langle x' | \Psi \rangle}_{\Psi(x')} \\ &= \int dx \int dx' \Psi^*(x) \cdot \delta(x-x') A(x') \cdot \Psi(x') \\ \langle \hat{A} \rangle &= \int dx \Psi^*(x) A(x) \Psi(x) .\end{aligned}$$

Der Erwartungswert ist eine basisunabhängige Zahl und lässt sich mit jeder beliebigen VON-Basis bzw. durch geeignetes Einschreiben von $\mathbb{1}$ - oder Identitätsoperatoren darstellen.

14. Reine Zustände:

Im Fall reiner Zustände $|\Psi\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \Psi \rangle$ existieren über das betrachtete quantenmechanische System vollständige Informationen. Die **prinzipiell-quantenmechanische Wahrscheinlichkeit** p_i mit der dann die Messwerte (Eigenwerte) λ_i auftreten, ist deshalb Ausdruck des **spezifisch quantenmechanischen Indeterminismus**.

15. Wahrscheinlichkeit p_i für das Auftreten des Messwertes λ_i bzw. des reinen Zustands $|\Psi\rangle$, dargestellt in der (diskreten) VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$:

$$p_i = |c_i|^2 = \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \Psi \rangle \quad \Rightarrow \quad \sum_i p_i = \sum_i \langle \Psi | a_i \rangle \langle a_i | \Psi \rangle = 1 .$$

Die Wahrscheinlichkeiten $|c_i|^2$ besitzen kein Maßeinheit, sind also dimensionslos. Die diskreten Entwicklungskoeffizienten c_i nennt man auch Wahrscheinlichkeitsamplituden.

16. **Wahrscheinlichkeit** Δp für das Auftreten eines **reinen Zustands** $|\Psi\rangle$ bezüglich einer (**kontinuierlichen**) Basis $\{|v_x^D\rangle\}$:

$$\Delta p = \int_{x_1}^{x_2} dx \langle \Psi | v_x^D \rangle \langle v_x^D | \Psi \rangle = \int_{x_1}^{x_2} dx \Psi^*(x) \Psi(x)$$

$$\Rightarrow p = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x) \Psi(x) = 1$$

mit der **Wahrscheinlichkeitsdichte** $\Psi^*(x) \Psi(x) = |\Psi(x)|^2$. Die Funktion $\Psi(x)$ heißt ebenfalls **Wahrscheinlichkeitsamplitude**, auch wenn sie sich in ihrem mathematischen Wesen von den diskreten Entwicklungskoeffizienten c_i unterscheidet. Denn genau genommen ist die Funktion $\Psi(x)$ die Änderung der Wahrscheinlichkeitsamplitude c_i pro Wurzel aus der Änderung von x . Die Wahrscheinlichkeitsdichte $|\Psi(x)|^2$ besitzt in dem hier betrachteten eindimensionalen allgemeinen Fall die Dimension $(x)^{-1}$.

Wenn x die Ortskoordinate ist, dann besitzt $|\Psi(x)|^2$ die Dimension $(\text{Länge})^{-1}$. Und im Fall des dreidimensionalen Ortsraums besitzt $|\Psi(\vec{r})|^2$ die Dimension $(\text{Länge})^{-3}$.

17. **Gemischte Zustände:**

Im Fall gemischter Zustände $|\Phi\rangle$ existieren über das betrachtete quantenmechanische System keine vollständigen Informationen. Ein gemischter Zustand $|\Phi\rangle$ besteht dabei aus einer Gesamtheit von reinen Zuständen $|\Psi_n\rangle$, die jeweils mit ihrer **klassisch-statistischen Wahrscheinlichkeit** w_n auftreten. Die w_n resultieren z. B. aus den „prinzipiell vermeidbaren“ Messfehlern.

18. **Kombinierte Wahrscheinlichkeit** W_i für das Auftreten des Messwertes (Eigenwertes) λ_i im Fall eines **gemischten Zustands** $|\Phi\rangle$, repräsentiert durch die Gesamtheit der in der VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$ dargestellten reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$:

$$W_i = \sum_n w_n \cdot p_{in} = \sum_n w_n \cdot |c_{in}|^2 = \sum_n w_n |\langle a_i | \Psi_n \rangle|^2.$$

Die kombinierte Wahrscheinlichkeit W_i setzt sich also zusammen aus den prinzipiell-quantenmechanischen Wahrscheinlichkeiten p_{in} für das Auftreten eines Messwertes λ_i bezüglich der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$ und den klassisch-statistischen Wahrscheinlichkeiten w_n für das Auftreten der reinen Zustände $|\Psi_n\rangle$.

19. **Ortsdarstellung eines Zustands** $|\Psi\rangle$ in der kontinuierlichen Basis $\{|x\rangle\}$ aus den Ortseigenzuständen $|x\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x|\Psi\rangle &= \langle x|\int dx' |x'\rangle \underbrace{\langle x'|\Psi\rangle}_{\Psi(x')} \\ &= \int dx' \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} \Psi(x') = \Psi(x) \\ \Rightarrow |\Psi\rangle &= \int dx |x\rangle \underbrace{\langle x|\Psi\rangle}_{\Psi(x)} = \int dx \Psi(x) |x\rangle .\end{aligned}$$

20. **Entwicklung** eines Zustands $|\Psi\rangle$ nach einer diskreten VON-Basis $\{|a_i\rangle\}$ in Ortsdarstellung:

$$\begin{aligned}|\Psi\rangle &= \sum_i |a_i\rangle \langle a_i|\Psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle \Rightarrow \\ \Psi(x) = \langle x|\Psi\rangle &= \sum_i \langle x|a_i\rangle \langle a_i|\Psi\rangle \\ &= \sum_i \int dx' \underbrace{\langle x|x'\rangle}_{\delta(x-x')} \underbrace{\langle x'|a_i\rangle}_{a_i(x')} \langle a_i|\Psi\rangle \\ &= \sum_i a_i(x) \cdot \langle a_i|\Psi\rangle = \sum_i a_i(x) \cdot c_i \\ &= \sum_i a_i(x) \int dx \langle a_i|x\rangle \langle x|\Psi\rangle \\ &= \sum_i a_i(x) \int dx a_i^*(x) \Psi(x)\end{aligned}$$

mit

$$c_i = \langle a_i|\Psi\rangle = \int dx a_i^*(x) \Psi(x) .$$

21. **Ortsdarstellung der Ortseigenfunktionen**, d.h. der Eigenfunktionen $|x\rangle$ zum Ortsoperator $\hat{x}$:

$$|x\rangle \longrightarrow \langle x'|x\rangle = \delta(x - x') .$$

Daraus folgt dann

$$\int dx' \langle x'|x\rangle = \int dx' \delta(x - x') = 1 .$$

$\delta(x-x')$ ist der Ausdruck für eine Dichte, die (streng) lokalisiert im Punkt $x' = x$ unter dem Integral einen Betrag mit dem Wert 1 liefert. Die Ortsdarstellung $\langle x'|x\rangle$ der Ortseigenfunktionen $|x\rangle$ besitzt deshalb die Maßeinheit $\frac{1}{[x]}$.

22. Fourier-Transformation:

Die Fourier-Transformation einer Wellenfunktion $\Psi(\vec{r}) \in \mathbf{L}^2(\mathbb{R}^3)$ vom Orts- in den Impulsraum ist

$$\mathcal{F} : \quad \tilde{\Psi}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int d^3r \, \Psi(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} .$$

Die zugehörige inverse Fourier-Transformation (Rücktransformation) der Funktion $\tilde{\Psi}(\vec{p})$ vom Impuls- in den Ortsraum ist

$$\mathcal{F}^{-1} : \quad \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} \int d^3p \, \tilde{\Psi}(\vec{p}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}} .$$

Die **δ -Funktion im Impulsraum** ist sowohl gleich der Impulsdarstellung der Impulseigenfunktion als auch gleich der Fouriertransformierten der Ortsdarstellung der Impulseigenfunktion:

$$\delta(\vec{p} - \vec{p}') = \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3r \, e^{-\frac{i}{\hbar} (\vec{p} - \vec{p}') \cdot \vec{r}} .$$

Die Ortsdarstellung der Impulseigenfunktion ist nämlich

$$\langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle = \Psi_{\vec{p}'}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{r}}$$

und beschreibt eine ebene Welle zum Zeitpunkt $t = 0$.

Die **δ -Funktion im Ortsraum** ist sowohl gleich der Ortsdarstellung der Ortseigenfunktion als auch gleich der Fouriertransformierten der Impulsdarstellung der Ortseigenfunktion:

$$\delta(\vec{r} - \vec{r}') = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int d^3p \, e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} .$$

Die Impulsdarstellung der Ortseigenfunktion ist nämlich

$$\langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle = \Psi_{\vec{r}'}(\vec{p}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}^3} e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'}$$

und beschreibt eine ebene Welle zum Zeitpunkt $t = 0$.

12 Produktansatz bzw. Separationsansatz

Die stationäre Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen der Masse m im dreidimensionalen (mehrdimensionalen) Ortsraum ist

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{U}(\vec{r}) .$$

Wenn sich dieses Teilchen im unendlich hohen dreidimensionalen Potentialtopf mit der kinetischen Energie $\vec{p}^2/(2m) = \hbar^2 \vec{k}^2/(2m) = \hbar^2 k^2/(2m)$ frei bewegt, ist innerhalb des Topfs die potentielle Energie¹ $\hat{U} = 0$. Die stationäre Schrödinger-Gleichung hat unter diesen Bedingungen die einfache Form

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} \vec{k}^2 \Psi(\vec{r}) .$$

Entsprechende Äquivalenzumformung führt auf die homogene lineare partielle Differentialgleichung zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} \Delta \Psi(\vec{r}) + \vec{k}^2 \Psi(\vec{r}) &= 0 , \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x, y, z) + (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \Psi(x, y, z) &= 0 . \end{aligned} \quad (12.1)$$

Der Lösungsansatz

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(x, y, z) = e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} = e^{\lambda_x x + \lambda_y y + \lambda_z z} \quad (12.2)$$

liefert durch Einsetzen in die Differentialgleichung (12.1)

$$\begin{aligned} \lambda_x^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + \lambda_y^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + \lambda_z^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} &= 0 , \\ \underbrace{\lambda_x^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + k_x^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}}}_{\lambda_x^2 + k_x^2 = 0} + \underbrace{\lambda_y^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + k_y^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}}}_{\lambda_y^2 + k_y^2 = 0} + \underbrace{\lambda_z^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}} + k_z^2 e^{\vec{\lambda} \cdot \vec{r}}}_{\lambda_z^2 + k_z^2 = 0} &= 0 , \end{aligned}$$

drei voneinander unabhängige quadratische Bestimmungsgleichungen für die Parameter λ_i . Deren Lösungen

$$\lambda_{x1} = +ik_x , \quad \lambda_{y1} = +ik_y , \quad \lambda_{z1} = +ik_z$$

und

$$\lambda_{x2} = -ik_x , \quad \lambda_{y2} = -ik_y , \quad \lambda_{z2} = -ik_z$$

¹Es ist üblich aber nicht korrekt für die potentielle Energie den Begriff „Potential“ zu verwenden.

setzen wir jeweils in den Ansatz (12.2) ein und erhalten so die Fundamentalbasis:

$$\Psi(\vec{r}) = e^{\lambda_{x1}x + \lambda_{y1}y + \lambda_{z1}z} + e^{\lambda_{x2}x + \lambda_{y2}y + \lambda_{z2}z} = e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}.$$

Mit dieser Fundamentalbasis ist die allgemeine Lösung der mehrdimensionalen stationären Schrödinger-Gleichung für ein Teilchen im unendlich hohen Potentialtopf schließlich

$$\Psi(\vec{r}) = C_1 e^{+i\vec{k}\cdot\vec{r}} + C_2 e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}.$$

Produkt- bzw. Separationsansatz

Wir zeigen jetzt ein allgemeines Verfahren zur Lösung von partiellen linearen Differentialgleichungen mit Hilfe des Produkt- bzw. Separationsansatzes am Beispiel des Hamilton-Operators für die drei Ortsraumdimensionen.

Der dreidimensionale Hamilton-Operator

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}$$

ist die Summe der entsprechenden drei eindimensionalen Hamilton-Operatoren:

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + (U_x(x) + U_y(y) + U_z(z))$$

mit der potentiellen Energie $U(\vec{r}) = U_x(x) + U_y(y) + U_z(z)$. Die dreidimensionale stationäre Schrödinger-Gleichung

$$\hat{H} \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r})$$

lässt sich dann mit dem Produktansatz bzw. dem Separationsansatz

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi_x(x) \cdot \Psi_y(y) \cdot \Psi_z(z)$$

und wegen z. B.

$$\hat{H}_x \Psi(\vec{r}) = \hat{H}_x \Psi_x(x) \Psi_y(y) \Psi_z(z) = \Psi_y \Psi_z \cdot \hat{H}_x \Psi_x$$

wie folgt in drei eindimensionale stationäre Schrödinger-Gleichungen separieren:

$$\Psi_y \Psi_z \cdot \hat{H}_x \Psi_x + \Psi_z \Psi_x \cdot \hat{H}_y \Psi_y + \Psi_x \Psi_y \cdot \hat{H}_z \Psi_z = E \Psi_x \Psi_y \Psi_z.$$

Die Division durch $\Psi_x \Psi_y \Psi_z$ ergibt schließlich

$$\underbrace{\frac{\hat{H}_x \Psi_x}{\Psi_x}}_{=E_x} + \underbrace{\frac{\hat{H}_y \Psi_y}{\Psi_y}}_{=E_y} + \underbrace{\frac{\hat{H}_z \Psi_z}{\Psi_z}}_{=E_z} = E_x + E_y + E_z = E.$$

Wie man sieht, vereinfacht sich die Lösung der partiellen (mehrdimensionalen) linearen Differentialgleichung durch die Separation in eindimensionale lineare Differentialgleichungen. Diese sind, jede für sich, leicht lösbar.